

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки Материаловедение и технологии материалов
 Отделение школы (НОЦ) Отделение материаловедения

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
«Исследование изменений электронной структуры атомов при деформации металлов и сплавов»

УДК 539.183:669-004.923

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4БМ9И	Ботаева Лариса Борисовна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Д.т.н., профессор ОМ ИШНПТ НИ ТПУ	Клименов В.А.	Д.т.н., профессор		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП НИ ТПУ	Меньшикова Е.В.	К.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
И.о. руководителя, доцент ООД НИ ТПУ	Пашков Е.Н.	К.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
22.04.01 Материаловедение и технологии материалов	Панин С.В.	Д.т.н., профессор		

Томск – 2021 г.

Планируемые результаты обучения ООП

Код компетенции	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах жизненного цикла
УК(У)-3	Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном языке, для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен решать производственные и/или исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов
ОПК(У)-2	Способен разрабатывать научно-техническую, проектную и служебную документацию, оформлять научно-технические отчеты, обзоры, публикации, рецензии
ОПК(У)-3	Способен участвовать в управлении профессиональной деятельностью, используя знания в области системы менеджмента качества
ОПК(У)-4	Способен находить и перерабатывать информацию, требуемую для принятия решений в научных исследованиях и в практической технической деятельности
ОПК(У)-5	Способен оценивать результаты научно-технических разработок, научных исследований и обосновывать собственный выбор, систематизируя и обобщая достижения в области материаловедения и технологии материалов, смежных областях
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способен обоснованно (осмысленно) использовать знания основных типов металлических, неметаллических и композиционных материалов различного назначения, в том числе наноматериалов для решения профессиональных задач.
ПК(У)-2	Способен осуществлять рациональный выбор материалов и оптимизировать их расходование на основе анализа заданных условий эксплуатации материалов, оценки их надежности, экономичности и экологических последствий применения
ПК(У)-3	Способен осуществлять анализ новых технологий производства материалов и разрабатывать рекомендации по составу и способам обработки конструкционных, инструментальных, композиционных и иных материалов с целью повышения их конкурентоспособности
ПК(У)-4	Способен планировать и осуществлять экспериментальные исследования, анализировать и обрабатывать их результаты, делать выводы, составлять и оформлять отчеты по проведенным исследованиям
ПК(У)-5	Способен выполнять перевод технической литературы на иностранном

	языке, связанной с профессиональной деятельностью в области материаловедения
ПК(У)-6	Способен определять соответствие готового изделия заявленным потребительским характеристикам; прогнозировать и описывать процесс достижения заданного уровня свойств в материале
ПК(У)-7	Способен организовать проведение анализа и анализировать структуру новых материалов, адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства и разрабатывать специальные методики
ПК(У)-8	Способен моделировать процессы обработок и прогнозировать результаты их осуществления при различных режимах, в использовании стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки (специальность) Материаловедение и технологии материалов
 Отделение школы (НОЦ) Отделение материаловедения

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ С.В. Панин
 (Подпись) (Дата)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
4БМ9И	Ботаева Лариса Борисовна

Тема работы:

«Исследование изменений электронной структуры атомов при деформации металлов и сплавов»	
Утверждена приказом директора ИШНПТ	Приказ № 62-46/с от 15.06.2021

Срок сдачи студентом выполненной работы:	15.06.2021
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Цель исследования – выяснить связь деформации кристаллической решетки с изменением электронной подсистемы твердого тела. Объектом исследования являются образцы сплава Ti-6Al-4V (BT6), подвергнутого деформации поперечно-винтовой прокаткой при температуре 1000°C.
---------------------------------	---

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1.Провести литературный обзор российских и зарубежных источников. 2.Провести исследование электронной структуры сплава ВТ6, подвергнутого деформации поперечно-винтовой прокаткой при температуре 1000°C. 3.Провести графическую обработку полученных результатов.
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	Презентация в Microsoft Office PowerPoint 2010
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент	Е.В. Меньшикова, доцент ОСГН ШБИП НИ ТПУ
Социальная ответственность	Е.Н. Пашков, и.о. руководителя, доцент ООД НИ ТПУ
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
2. Исследование электронной структуры и угловых зависимостей выхода упруго и дискретно рассеянных электронов из поверхности деформированного методом поперечно-винтовой прокатки при 1000°C сплава Ti-6Al-4V	2. Research of Electronic Structure and Angular Dependencies of Elastic and Discrete Electrons Scattered From the Surface of a Deformed Alloy Ti-6Al-4V

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	26.02.2021
---	------------

Задание выдал руководитель ВКР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОМ ИШНПТ НИ ТПУ	Клименов Василий Александрович	Д.т.н., профессор		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4БМ9И	Ботаева Лариса Борисовна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 110 страниц, 22 рисунка, 22 таблицы, 52 использованных источника, 1 приложение.

Ключевые слова: рассеяние энергии электронами, спектры упруго и дискретно рассеянных электронов, поперечно-винтовая прокатка при 1000°C, титановый сплав ВТ6.

Объектом исследования являются образцы сплава ВТ6, исходного и подвергнутого деформации поперечно-винтовой прокаткой при температуре 1000°C.

Цель работы – выяснить связь деформации кристаллической решетки с изменением электронной подсистемы твердого тела.

Предметом исследования являются вторично-электронные спектры, эмитированных электронов под действием пучка первичных электронов.

В процессе исследования проводился анализ изменения формы спектров вторичных электронов от исходных образцов сплава ВТ6 и образцов, подвергнутых деформации поперечно-винтовой прокаткой при температуре 1000°C с целью выявления связи изменения электронной подсистемы атомов со структурой кристаллических решеток.

Степень внедрения: в результате проведенного исследования продемонстрирована возможность исследования изменений энергетических уровней электронов зоны проводимости, валентной зоны, структурирования плазмонов и связи изменения энергии плазмонов с изменениями мезоскопических структурных состояний кристаллической решётки металлов и сплавов после модификации твердого тела.

Область применения: фундаментальные исследования изменений электронной структуры твердого тела, металлов и сплавов, покрытий после модификации их деформацией, пучковым воздействием.

В будущем планируется использовать изученный метод для исследования изменений энергетических уровней электронов зоны проводимости, валентной

зоны, структурирования плазмонов и связи изменения энергии плазмонов с изменениями мезоскопических структурных состояний кристаллической решётки металлов и сплавов после модификации твердого тела.

Оглавление

Введение	10
1. Обзор механизма упругого и дискретного рассеяния электронов при вторичной электронно-электронной эмиссии	12
1.1 Обзор механизмов вторичной электронно-электронной эмиссии	12
1.2 Пример анализа спектров упруго и дискретно рассеянных электронов...	19
1.3 Исследование электронной структуры и угловых зависимостей выхода рассеянных электронов из поверхности сплава ВТ6	23
2. Исследование электронной структуры и угловых зависимостей выхода упруго и дискретно рассеянных электронов из поверхности сплава ВТ6, деформированного методом поперечно-винтовой прокатки при 1000°С	37
2.1 Материалы и методы исследования	38
2.2 Результаты исследования	41
3. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	55
3.1 Предпроектный анализ	57
3.2 Инициация проекта	62
3.3 Расчет научного исследования (НТИ)	64
4. Социальная ответственность	76
4.1 Введение	78
4.2 Правовые и организационные меры обеспечения безопасности	79

4.3 Производственная безопасность	81
4.4 Электрическая безопасность	86
4.5 Экологическая безопасность	87
4.6 Защита в чрезвычайных ситуациях	87
4.7 Заключение по разделу социальная ответственность	88
Заключение	89
Перечень публикаций	91
Список литературных источников	93
Приложение. Раздел ВКР, выполненный на иностранном языке	99

Введение

Актуальность представленной работы состоит в необходимости апробации нового метода исследования изменений электронной структуры металлов и сплавов при модификации их деформацией, термической обработкой, а также ионно- электронно- пучковыми потоками.

Новизна этого метода состоит в создании и использовании нового способа регистрации вторично-электронных спектров и, на базе этого, создание методов исследования изменений электронно-энергетического строения твердого тела при модификации его термической обработкой, деформацией, а также ионно-электронно-пучковыми потоками.

Данный способ регистрации вторично-электронных спектров в интегральном виде, позволяет получать уникальную информацию об изменениях мезоскопических структурных состояний в кристаллической структуре металлов и сплавов.

Объектом исследования является серия образцов сплава ВТ6, подвергнутого деформации поперечно-винтовой прокаткой при температуре 1000°C.

Предметом исследования являются вторичные электроны, эмитированные из объекта исследования под действием пучка первичных электронов.

Цель работы – выяснить связь деформации кристаллической решетки с изменением электронной подсистемы твердого тела.

Для достижения цели необходимо решить следующие задачи:

1. Провести обзор теории и практики применения спектроскопии упруго и дискретно рассеянных электронов при вторичной электронно-электронной эмиссии и метода оже-спектроскопии на основе российских и зарубежных источников.
2. Изучить метод, основанный на анализе распределения энергии электронов, эмитированных исследуемым веществом под действием

пучка первичных электронов, и выделении из общего энергетического спектра тех, которые возникли в результате оже-процесса.

3. Провести графическую обработку экспериментальных данных, полученных при исследовании сплава ВТ6, подвергнутом поперечно-винтовой прокатке при $T = 1000^{\circ}\text{C}$, в сравнении с исходным состоянием.

Методы исследования. В работе использовались методы регистрации спектров на модернизированном оже-спектрометре 09-ИОС-10 в Институте физики прочности и материаловедения СО РАН и последующий анализ изменений электронной структуры сплава ВТ6 после деформации.

Практическая значимость работы. Изученный метод сможет дать уникальные возможности для интерпретации полученных вторично-электронных спектров, позволит оценивать влияние и связи изменений мезоскопических структурных состояний кристаллической решётки металлов и сплавов на вторично-электронные спектры и спектры дискретно рассеянных электронов.

1 ОБЗОР МЕХАНИЗМА УПРУГОГО И ДИСКРЕТНОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ВТОРИЧНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ

1.1 Обзор механизмов вторичной электронно-электронной эмиссии

Оже-электронные спектры широко используют для исследования процессов физико-химических превращений в твердых телах.

Понимание связи изменения формы и энергетических сдвигов оже-спектров с физико-химическими превращениями в твердых телах и последующей интерпретацией полученных спектров, с целью получения информации об исследуемом объекте, достаточно сложный процесс, который требует представления сложного механизма образования и выхода оже-электронов в вакуум.

Оже-электроны – это производные от процесса вторично электронной эмиссии, иными словами, это вторичные электроны, несущие информацию об элементном составе твердого тела. А механизмы вторично электронной эмиссии подробно рассмотрены во многих работах, в частности [1–11].

Твердое тело рассматривают как коллектив положительных ионов, совершающих малые колебания около своих положений равновесия, и электронного газа, образованного электронами, наиболее слабо связанными с ядром.

Стационарные энергетические уровни электронов в кристалле отличаются от конфигурации энергетических уровней электрона в изолированном атоме. Электроны в кристалле образуют системы последовательно расположенных энергетических уровней, называемых зонами.

Наиболее слабо связанные с ионным остовом электроны образуют валентную зону, за ней следует запрещенная зона, затем зона проводимости. Электроны, сильно связанные с ядрами, не принимают участия в образовании связей атомов в кристалле, поэтому энергии заполненных электронных

оболочек у ионов кристаллического остова остаются почти такими же, как и в свободных атомах.

Электроны, при вторично электронной эмиссии, разделяют на:

1. Упруго рассеянные электроны (УРЭ);
2. Не упруго рассеянные;
3. Вторичные электроны.

На примере графика распределения электронов по энергии при вторично электронной эмиссии (рисунок 1.1), который широко используется в учебниках и монографиях, можно рассмотреть механизм вторичной электронно-электронной эмиссии.

Упруго рассеянные: пик 1, расположенный при энергии, равной энергии первичного падающего пучка, соответствует упруго рассеянными электронам. В этом случае принимается, что этот пик включает в себя электроны, которые могли рассеяться на фонах, поскольку в большинстве приборов столь малые переданные энергии не могут быть зафиксированы.

Электроны, упруго отраженные твердым телом, выходят в вакуум в результате индивидуальных актов упругого взаимодействия с отдельными атомами твердого тела. Взаимодействие электронов с атомами характеризуется эффективным сечением – это физическая величина, характеризующая вероятность перехода системы двух взаимодействующих частиц в определенное конечное состояние.

Количественно эффективное сечение определяется как отношение числа взаимодействий N в единицу времени, для потока частиц сорта 1 с плотностью n_1 , летящих со скоростью v_1 и падающих на мишень, состоящую из частиц сорта 2 с плотностью n_2 и объёмом V , к плотности потока $n_1 v_1$ и к числу частиц в мишени $n_2 V$:

$$\sigma = \frac{N}{n_1 v_1 n_2 V} . \quad (1.1)$$

Эффективное поперечное сечение имеет размерность площади.

Эффективное сечение характеризует, процесс поглощения частиц. Из известного сечения поглощения и плотности поглощающих центров n_2 можно подсчитать коэффициент поглощения μ частиц сорта 1 в материале мишени: $\mu = n_2 \sigma$.

В случае упругого рассеяния, частицы вылетают под разными углами по отношению к направлению импульса падающей частицы. Описание этого процесса даёт дифференциальное эффективное сечение $d\sigma/d\Omega$, в определение которого вместо полного числа взаимодействий в единицу времени входит дифференциал числа взаимодействий в единицу времени dN , в результате которых частица сорта 1 приобрела импульс с направлением в элементе телесного угла $d\Omega$:

$$d\sigma = \frac{dN}{n_1 v_1 n_2 V} \quad \text{или} \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\frac{dN}{d\Omega}}{n_1 v_1 n_2 V} . \quad (1.2)$$

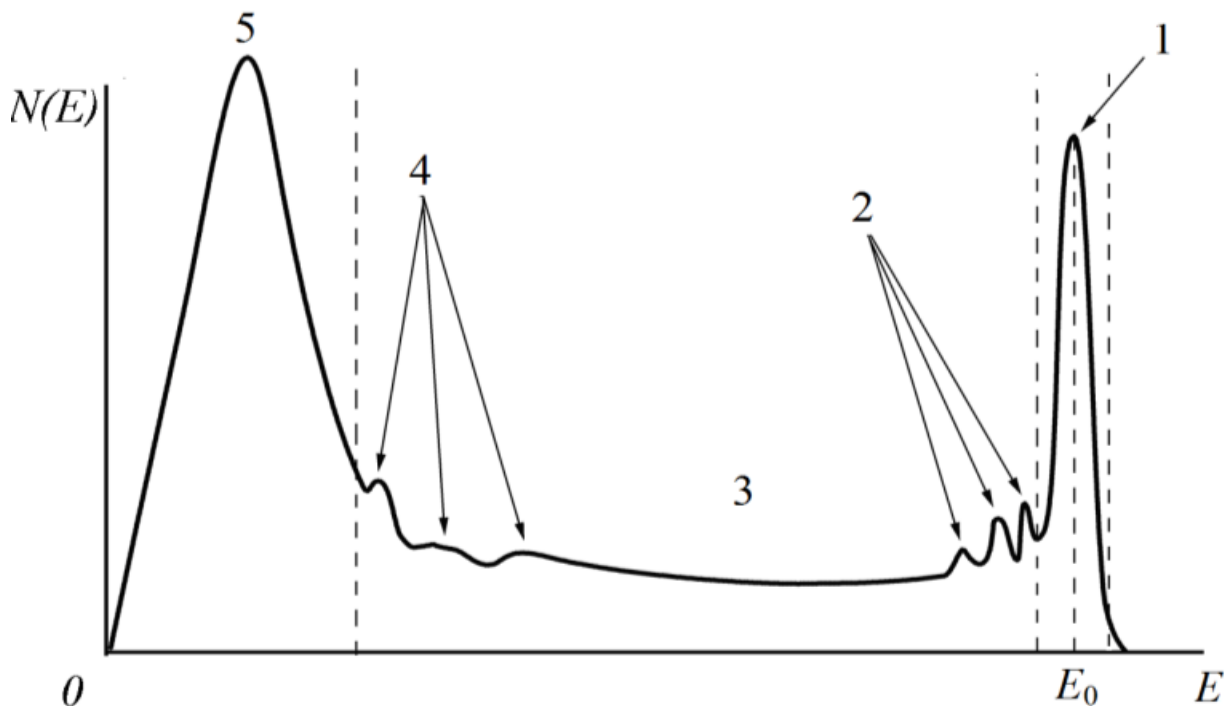


Рисунок 1.1 – График распределения электронов по энергии при вторично электронной эмиссии: 1 – пик упруго отраженных электронов; 2 – пики электронов испытавшие дискретные потери энергии при взаимодействии с плазмонами; 3 – участок спектра, демонстрирующий спектр электронов

рассеявших энергию в хаотических столкновениях; 4 – пики электронов с характеристическими энергиями, соответствующими элементному составу – оже-электроны; 5 – пик истинно вторичных электронов [2].

Интегрирование по полному телесному углу даёт полное сечение, для рассеяния на любые углы:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (1.3)$$

При наличии неупругих взаимодействий полное сечение складывается из сечения для упругих и неупругих рассеяний. Для каждого типа (канала) неупругих взаимодействий может быть введено отдельное эффективное сечение [12].

Ослабление электронного пучка в твердом теле описывается экспоненциальным законом с коэффициентом ослабления μ , который определяется по формуле $\mu = n \times (\sigma_y + \sigma_n)$. где n – концентрация рассеивающих атомов, σ_y , σ_n – интегральные сечения упругого и неупругого взаимодействия. Соответственно длина свободного пробега:

$$\lambda = \frac{1}{\mu} = \frac{\lambda_y \cdot \lambda_n}{\lambda_y + \lambda_n}, \quad (1.4)$$

где

$\lambda_y = \frac{1}{n \cdot \sigma_y}$ и $\lambda_n = \frac{1}{n \cdot \sigma_n}$ длины свободного пробега электрона относительно упругого и неупругого взаимодействия.

Выход электронов, упруго рассеянных твердым телом, описывается экспоненциальной зависимостью [3, 13]:

$$I(z) = I_0 \cdot e^{-\frac{z}{\lambda_{осл}}}, \quad (1.5)$$

где $\lambda_{осл}$ определяется по ослаблению интенсивности первичного пучка электронов при прохождении им пути z . Информационная глубина $\lambda_{инф} \approx (3 \div 5) \lambda_{осл}$, поэтому $\lambda_{инф} \sim (0,3 \div 1)$ нм в области энергий $E = 30 \div 70$ эВ, затем растет с

энергией и достигает значений порядка 10 нм в области E - (3-5) кэВ. Из этого следует, что для анализа приповерхностных слоёв оптимальной является область средних энергий $E < (2\div 3)$ кэВ. Достаточно подробный анализ механизма рассеяния электронов при энергиях $E > 5$ кэВ приведен в работах [14, 15].

Не упруго рассеянные: обычно под не упруго рассеянными электронами подразумеваются те, которые потеряли энергию, по крайней мере, в одном акте рассеяния. Пики 2 соответствуют электронам, испытавшим дискретные потери энергии при взаимодействии с плазмонами.

Плазмон (квант плазменных колебаний) — псевдочастица, представляющая собой сочетание колеблющихся электронов и связанного с ним электромагнитного поля.

Упорядоченные, в соответствии с кристаллической решёткой, заряженные частицы, в невозбуждённом состоянии, колеблются с определённой энергией и частотой. При облучении первичными электронами «электронный газ», из-за кулоновского взаимодействия и взаимодействия с положительно заряженными остовами структурируются в плазмоны, которые возникают в твердых телах или вблизи их поверхности. Возмущение плотности заряда создаст электрическое поле, которое вызывает ток, стремящийся восстановить электронейтральность из-за инерции носители «проскакивают» положение равновесия, что и приводит к коллективным колебаниям. Свойства плазмона зависят от зонной структуры кристалла (этим плазмон в плазме твердого тела отличается от плазмона в газовой плазме), наличия границ и магнитного поля, эффективной размерности системы.

Различают объемные и поверхностные плазмоны. Объемные существуют при колебаниях электронов внутри ионной решетки вещества. Поверхностные — это кванты колебаний плотности свободных электронов металла вдоль его границы с диэлектриком. Плазмон является квантом плазменных осцилляций и имеет энергию $\hbar\omega$ около 15 эВ. С классической точки зрения плазменная

частота определяется осцилляциями валентных электронов в металле по отношению к положительно заряженным остовам атомов [16, 17, 18].

Объемные плазмоны. Обычный плазмон – чисто продольное колебание. В неограниченном образце спектр плазмона – зависимость его частоты ω от волнового вектора $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$ – определяется из дисперсионного уравнения

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 0 \quad (1.6)$$

где $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ – продольная диэлектрическая проницаемость системы.

В модели «желе» (периодический потенциал решетки заменяется однородным положительным зарядом, на фоне которого колеблются электроны) в длинноволновом пределе плазмон имеет частоту (плазменная, или ленгмюровская частота) [19]:

$$\omega_{pe} \left[\frac{\text{рад}}{\text{сек}} \right] = \sqrt{\frac{4\pi N_{pe} e^2}{m_e}} \approx 5,64 \cdot 10^4 \sqrt{N_{pe} [\text{см}^{-3}]}, \quad (1.7)$$

$$f_{pe} = \frac{\omega_{pe}}{2\pi} = 0,9 \cdot 10^4 \sqrt{N_{pe}} [\text{Гц}] \quad (1.8)$$

Для металлов энергия плазмона $\hbar\omega = 5 \div 30 \text{ эВ}$. В общем случае спектр плазмонов сложным образом связан с зонной структурой твердого тела.

Поверхностные плазмоны. Колебание плотности заряда, локализованное у границы раздела твердых тел, называют поверхностным плазмоном. Для резкой и плоской границы кристалл вакуум $\varepsilon(\omega) = -1$, откуда в модели «желе» получаем частоту поверхностного плазмона:

$$\omega_{se} \left[\frac{1}{\text{сек}} \right] = \sqrt{\frac{4\pi N_{se} e^2}{(\varepsilon_0 + 1)m_e}} \approx 5,64 \cdot 10^4 \sqrt{0,5 \cdot N_{se} [\text{см}^{-3}]} \quad (3.9)$$

$$f_{se} = \frac{\omega_{se}}{2\pi} = 0,9 \cdot 10^4 \sqrt{0,5 \cdot N_{se}} [\text{Гц}].$$

Длина волны плазмона равна:

$$\lambda=c/f, \quad (1.10)$$

где c - скорость света $\approx 3 \cdot 10^{17}$ нм/сек.

Энергия объёмного плазмона определяется из выражения:

$$E_p = \hbar \cdot \omega_{pe}, \quad (1.11)$$

заменив ω_p значением из (1.7) получим:

$$E_p = \hbar \cdot \sqrt{\frac{4\pi N_{pe} e^2}{m_e}} \approx \hbar \cdot 5,64 \cdot 10^4 \sqrt{N_{pe} [cm^{-3}]}, \quad (1.12)$$

а энергия поверхностного плазмона определяется из выражения:

$$E_s = \hbar \cdot \omega_{se}, \quad (1.13)$$

заменив ω_{se} значением из (1.9) получим:

$$E_s = \hbar \cdot \sqrt{\frac{4\pi N_{se} e^2}{(\epsilon_o + 1)m_e}} \approx \hbar \cdot 5,64 \cdot 10^4 \sqrt{\frac{N_{se}}{2} [cm^{-3}]}, \quad (1.14)$$

где \hbar приведённая постоянная Планка или постоянная Дирака $\hbar = h/2\pi$.
Постоянная Планка $h \approx 6,62606957 \cdot 10^{-34}$ Дж·с $\approx 4,136 \cdot 10^{-15}$ эВ·с, постоянная Дирака $\hbar \approx 1,055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с $\approx 6,582 \cdot 10^{-16}$ эВ·с.

Энергия плазмонов зависит только от плотности электронов проводимости N_e , поскольку другие составляющие постоянные. Преобразуя (1.12) и (1.14), определяем плотность электронов в объёмном плазмоне:

$$N_{pe} = \frac{E_{pe}^2}{\hbar^2 \cdot K^2}, \quad (1.15)$$

и плотность электронов в поверхностном плазмоне:

$$N_{se} = \frac{2 \cdot E_{se}^2}{\hbar^2 \cdot K^2}, \quad (1.16)$$

где $K = 5,64 \cdot 10^4$.

Подставим числовые значения \hbar и K и получим:

$$N_{pe} = \frac{E_p^2 [эВ^2] \cdot [c^2]}{43,323 \cdot 10^{-32} \cdot 31,81 \cdot 10^8 [эВ^2 \cdot c^2]} [cm^{-3}] = \frac{E_p^2 \cdot 10^{23}}{137,8} [cm^{-3}] = \frac{E_p^2}{1,378} [nm^{-3}], \quad (1.17)$$

$$N_{se} = \frac{E_s^2 \cdot 10^{23}}{68,9} [\text{см}^{-3}] = \frac{E_s^2}{0,689} [\text{нм}^{-3}]. \quad (1.18)$$

Участок спектра 3 (рисунок 1.1), это электроны, претерпевшие несколько актов рассеяния или потерявшие энергию на возбуждение континуума (сплошная среда), обычно дают вклад в бесструктурный спектр, простирающийся от низких энергий до упругого пика.

Пики 4 относятся к характеристическим электронам – оже-электронам.

Вторичные электроны: пики 5 соответствуют вторичным электронам. Большинство «истинных» вторичных электронов приводит к возникновению очень интенсивного пика, лежащего при низкой энергии, обычно менее 50 эВ. Предполагается, что они возникают в результате «каскадных» процессов потери энергии первичными высокоэнергетическими электронами. В общем случае нет способов разделения на «истинные» вторичные и не упруго рассеянные электроны.

На плазмонах рассеивают энергию, при выходе в вакуум, и оже-электроны, вследствие чего, на оже-спектрах, появляются сателлитные пики, которые также используют в интерпретации физико-химических превращений, поэтому подробнее рассмотрим механизм потерь энергии не упруго рассеянными электронами. Кроме того, в континууме электронно-дырочных возбуждений (межзонные переходы) при наличии четкой структуры начальной (заполненной) и конечной (пустой) плотностей состояний могут возникнуть дополнительные пики. Такие межзонные переходы обычно приводят к потерям энергии порядка нескольких электронвольт [5, 10].

1.2 Пример анализа спектров упруго и дискретно рассеянных электронов

Можно предположить, что электронный спектр не упруго отраженных электронов представляет набор пиков, которые воспроизводят структуру энергетических уровней в ионе кристаллического остова. Однако фиксируемый спектр, представляет собой картину значительно более сложную.

На рисунке 2 [5, 6, 10] представлен энергетический спектр, сформированный электронами, возникшими в результате упругого отражения. Пик 1 упруго отраженных электронов, которые изменили направление своего движения только за счет упругих каскадов столкновений. Помимо основной линии 1, присутствуют дополнительные пики электронов рассеявших энергию в столкновениях, при их выходе в вакуум. Линия 2, сформирована электронами, которые однократно не упруго рассеялись, потеряв энергию на возбуждение объёмных плазмонов. Линии 3, 4, 5, образованы электронами, которые дважды, трижды и четырехкратно теряли энергию на возбуждение плазмонов.

Рассмотрим образование линии 6 электронами, потерявшими энергию на возбуждение плазмонов в поверхностном слое твердого тела. Обозначим энергию поверхностного плазмона $\hbar\omega_{sp}$, а энергию объёмного плазмона $\hbar\omega_{pl}$ (ω_{sp} , ω_{pl} частота колебаний электронов в поверхностном слое и в объеме соответственно). Частота колебаний ω_{sp} электронов в поверхностном слое меньше, чем частота колебаний ω_{pl} электронов в объеме $\omega_{sp} < \omega_{pl}$, соответственно потеря энергии $\hbar\omega_{sp}$ на возбуждение поверхностного плазмона меньше потери энергии $\hbar\omega_{pl}$ на возбуждение объёмного плазмона. Поэтому линия 6 сдвинута вправо, по отношению к линии 2.

Линия 7 образована электронами, однократно рассеявшими энергию на одном поверхностном и одном объёмном плазмонах.

Потеря энергии быстрыми электронами идет по одинаковым правилам и не зависит от того, где и при каких условиях он родился. Форма спектра определяется длиной траектории, которую электрон проходит в мишени, и его начальной энергией. Длина траектории, пройденная в мишени электроном, определяет степень его участия в неупругих столкновениях разной кратности.

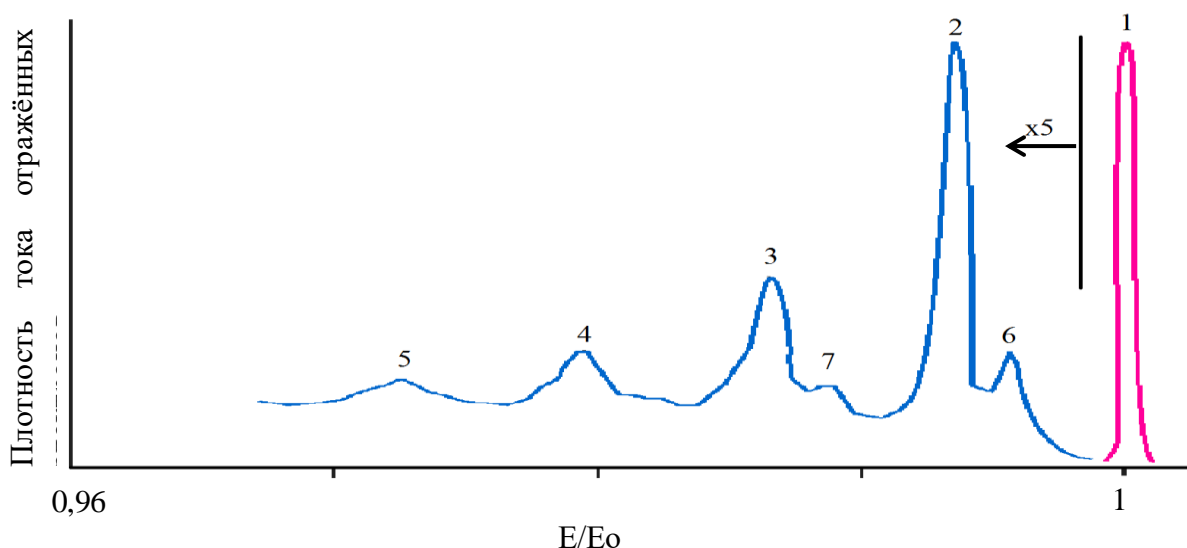


Рисунок 1.2 – Энергетический спектр электронов, отраженных от Al-мишени, измеренный в области малых потерь энергии (начальная энергия пучка электронов $E_0 = 2$ кэВ) [5, 6, 10]

Для демонстрации закономерности механизма выхода электронов, при ионизации атомов твердого тела, на рисунке 3 [5, 6, 10] представлен энергетический спектр, сформированный электронами, возникшими в результате фотоионизации $1s$ уровня металлического натрия. Помимо основной линии 1, соответствующей энергии связи $1s$ электронов, присутствуют дополнительные пики электронов рассеянных энергию в столкновениях, при их выходе в вакуум. Линия 2, сформирована электронами, которые однократно не упруго рассеялись, потеряв энергию на возбуждение объёмных плазмонов. Линии 3, 4, 5, образованы электронами, которые дважды, трижды, четырехкратно теряли энергию на возбуждение плазмонов. Линия 6 сформирована электронами, потерявшими энергию на возбуждение плазмонов в поверхностном слое твердого тела. Линия 7 образована электронами, однократно рассеявшими энергию на одном поверхностном и одном объемном плазмонах.

Интенсивность процесса рассеяния на объемных плазмонах значительно выше, чем на поверхностных (что следует из рисунка 1.2). Поэтому можно заключить, что часть траектории электрона, приходящаяся на приповерхностную область, в среднем значительно меньше той, которую электрон проходит в однородном массиве мишени. Соотношение интенсивностей рассеяния на объемном и поверхностном плазмонах не является характеристикой материала мишени, но определяется морфологией и состоянием ее поверхности.

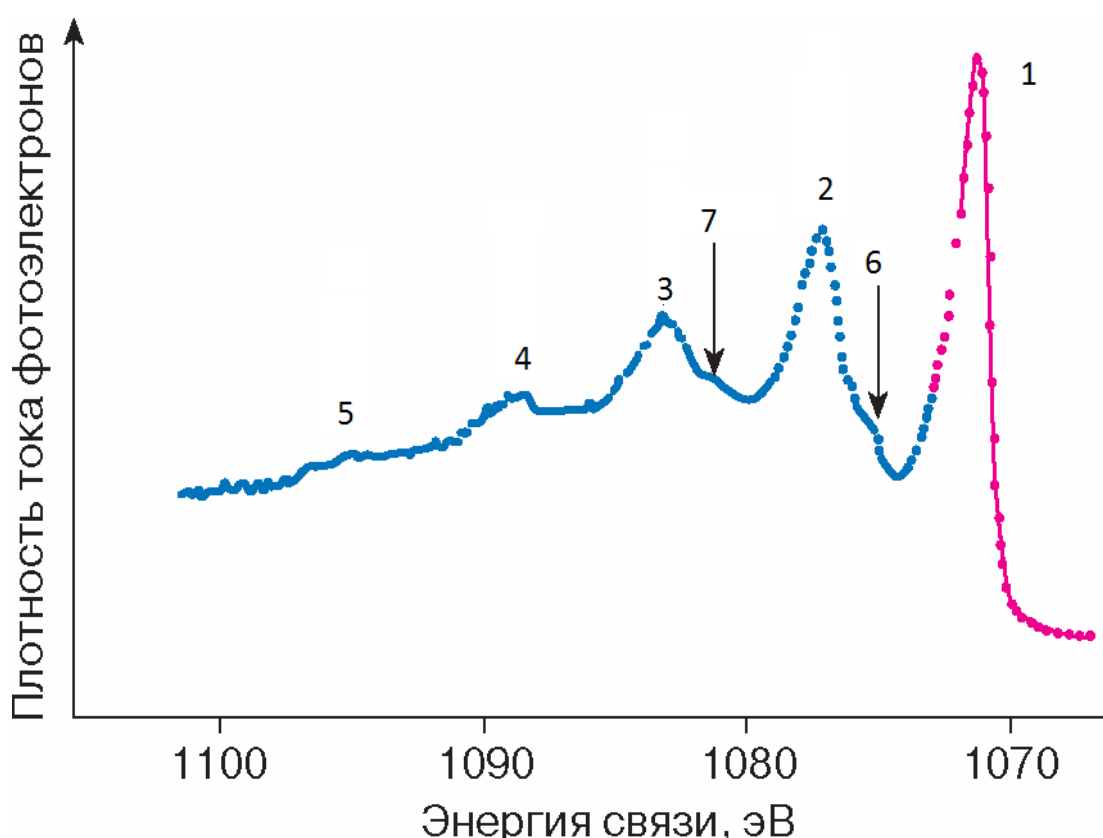


Рисунок 1.3 – Энергетический спектр фотоэлектронов, эмитированных с 1s - уровня натрия [5, 10]. Возбуждение атомов производилось рентгеновским излучением с K α уровня алюминия, энергия кванта 1486,6 эВ

1.3 Исследование электронной структуры и угловых зависимостей выхода упруго и дискретно рассеянных электронов из поверхности сплава ВТ6

У авторов [14], основываясь на колебании тонкого слоя, приведена схема распространения волны в двух направлениях (рис. 1.4а). Электронный газ, при возбуждении первичными электронами смещается по отношению к положительному ионному остову, который упорядочен в соответствии с кристаллической решёткой, поэтому распространение волны может происходить и в поперечном направлении, тогда схема плазменных колебаний будет выглядеть, как изображено на рисунке 1.4б.

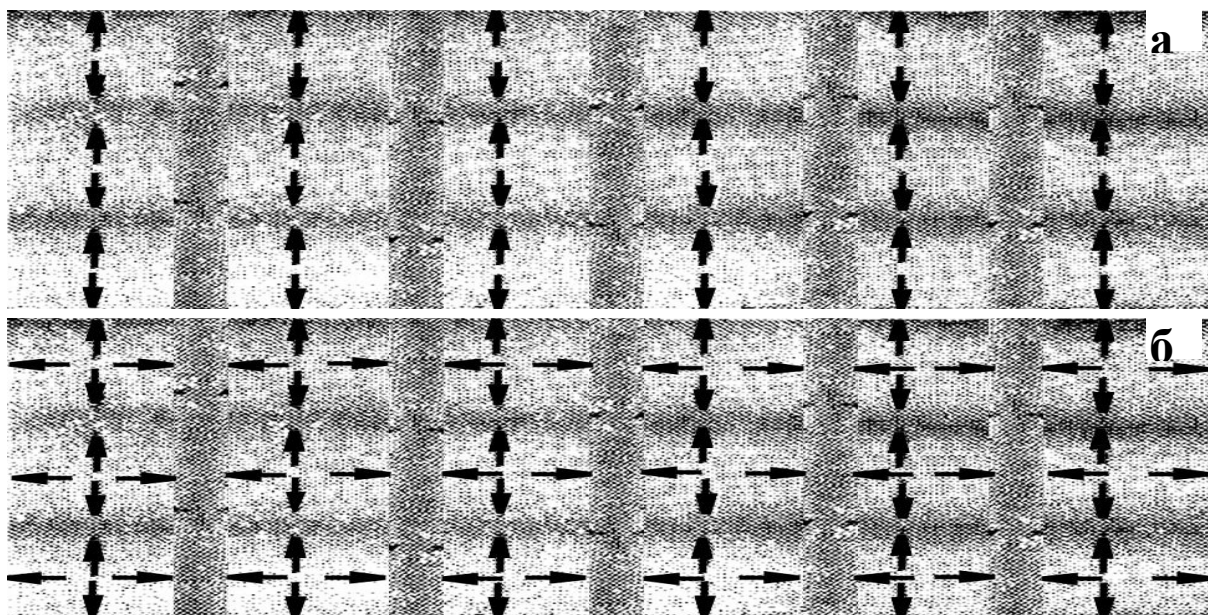


Рисунок 1.4 – а) схема плазменных колебаний с конечной длиной волны (меньше толщины пластинки). Стрелками показаны направления смещения электронов [14]; б) схема плазменных колебаний при образовании плазмонов

Исходя из этого, возможны формы плазмонов аналогичные изображениям фигур Хладни для колебаний тонких изотропных квадратных пластин со свободными краями, рисунок 1.5 [23].

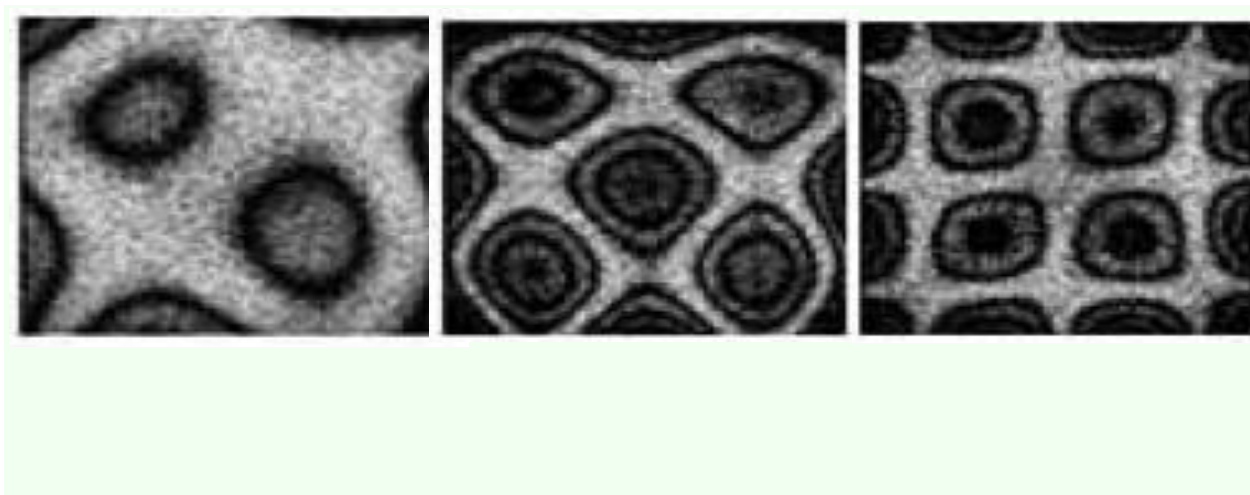


Рисунок 1.5 – Фигуры Хладни для квадратной пластины. Коэффициент Пуассона $\nu = 0.225$ [22]

Авторы исследования распространения поверхностных плазмонов-поляритонов приводят формы плазмонов при возбуждении оптическими квантами [24] (рисунок 1.6).

Можно предположить, что при возбуждении свободных электронов (электронного газа), образовавшиеся плазмоны приобретают энергию $\hbar\omega$ и частично передают импульс первичным, рассеявшим энергию в каскадах столкновений, электронам. Эти электроны получают энергию плазмонов $\hbar\omega$, рассеиваются («выбрасываются») в вакуум и отображаются на спектре вторично электронной эмиссии линиями 2.

Используя это предположение, на основе анализа изменения формы, энергии, интенсивности спектра дискретно рассеянных электронов, можем предположительно представить размеры и форму плазмонов. Используя формулы (1.7-1.18) оценим размеры плазмонов, образующихся при облучении электронами энергией 980эВ сплава ВТ6 в исходном состоянии.

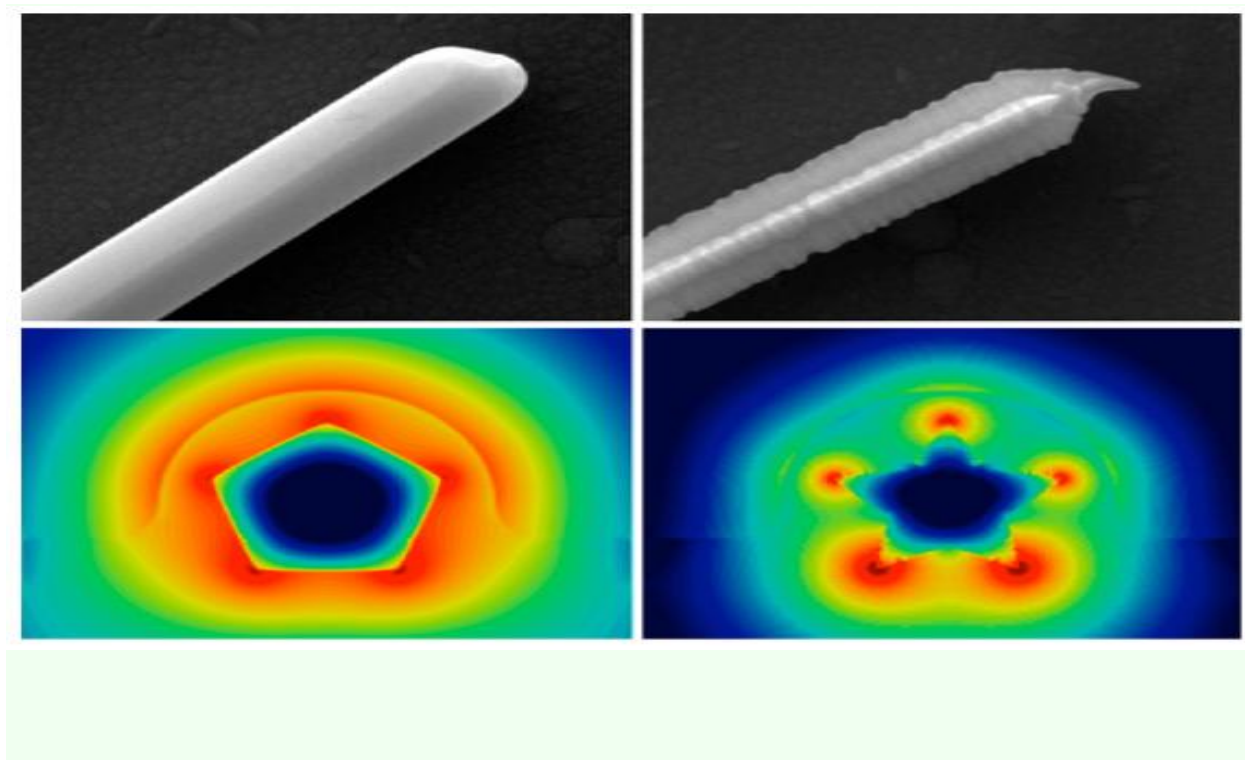


Рисунок 1.6 – Изображение нанопроводов (диаметр < 200 нм) с различной формой сечения, а также результаты моделирования транспорта поверхностных плазмонов-поляритонов [23]

Из экспериментальных спектров определены величины энергий и интенсивности электронов, рассеявших энергию на плазмонах, образовавшихся при возбуждении электронного газа. Известны теоретические и экспериментальные исследования по определению спектров рассеяния электронов на плазмонах. Величины энергий дискретного рассеяния электронов отсчитываются от энергии упруго рассеянных электронов и не зависят от величины энергии первичных электронов [20]. Для вычисления энергии плазмонов предлагаются формулы (1.7-1.9), но в этих формулах неизвестна величина N_e , которую можно определить по (1.11), зная величину энергии плазмонов. В данной работе, величины энергии плазмонов предлагается определить, взяв за ноль, начало спектра рассеяния $3s$ (рисунок 1.7б), эти значения приведены в таблице 1.1. Далее, используя эти данные, по формулам (1.17-1.18) вычисляется плотность электронов N_e , результаты представлены в

таблице 1. Так же в ней приведены плотности электронов (в нанометрах объёма, площади и длины). Также по формулам (1.7-1.9) можно вычислить частоты ω плазмонов, а по формуле (1.10) определить длину волны плазмонов, результаты представлены в таблице 1.2. Следует отметить, что вычисленные частоты плазмонов 1p - 2s и 2p - 3s хорошо согласуются с соотношением

частоты объёмного и поверхностного плазмонов $\omega_{se} = \frac{\omega_{pe}}{\sqrt{2}}$ [16]. Величины площади плазмонов, представленные в таблице, определены из предположения, что плазмоны приобретают форму, приближенную к квадратной. Процентное содержание плазмонов определено в соответствии с интенсивностью.

Если предположить, что длина волны, характеризует размер плазмона, то можно сделать вывод о том, что размеры плазмонов уменьшаются в зависимости от увеличения энергии. Имея данные по плотности электронов в плазмонах разных энергий (колеблющихся с соответствующей частотой), приведенные в таблице, плотности валентных электронов и фазовом составе можно графически изобразить электронную структуру сплава ВТ6 (далее – Ti-6Al-4V).

Известно, что сплав Ti-6Al-4V содержит примерно 60% ГПУ α -фазы и 40% ОЦК β -фазы [25]. На рисунке 1.8 изображены участки соседних зерен с ОЦК β -фазы (а) и ГПУ α -фазы (б), размеры элементарных ячеек, для наглядности, увеличены в 20 раз.

Легирующие добавки, такие как алюминий, β -фазы и повышают температуру α -углерод, азот и кислород, являются стабилизаторами перехода в титановых сплавах, тогда как ванадий, молибден, хром и железо стабилизируют переход. Таким образом, β -фазы и понижают температуру β кристаллическую решетку изменения концентраций легирующих элементов в составе титановых сплавов приводят к β -фаз при высоких температурах и влияют на показатели β - и α изменению соотношения сверхпластичности.

Алюминий в сплаве Ti-6Al-4V упрочняет и стабилизирует α -фазу, повышает прочностные и жаропрочные свойства, температуру A_{c3} , а также снижает удельный вес сплава. Ванадий являющийся β -стабилизатором, снижает температуру $\alpha \rightarrow \beta$ - перехода. С повышением его содержания увеличивается количество β -фазы, более пластичной при высоких температурах по сравнению с α -фазой, что способствует улучшению технологичности при температурах горячей деформации [12, 25]. Ванадий относится к числу тех немногих легирующих элементов в титане, которые повышают не только прочностные свойства, но и пластичность. Благоприятное влияние ванадия на пластические свойства связано с его специфическим влиянием на параметры решетки α -титана. Методом рентгеноструктурного анализа был исследован образец, полученный методом СЭЛП, в двух сечениях – продольном и поперечном. Было подтверждено фазы в структуре сплава. Также рассчитаны параметры решетки β и α наличие γ -фазы $a=2.9225$ Å, $c=4.6712$ Å, тетрагональность α (гексогональная плотноупакованная) фазы параметр решетки (ОЦК) $a=3,2101$ Å. Для β -фазы равна 1,6. Для α -фазы c/a равно результатам количественного фазового анализа. Процентное содержание β -фазы – 92%, α -фазы – 8%.

Используя величины (интенсивности, длины волн, соотношения плазмонов), приведённые в таблицах 1 и 2, на рисунке 1.9 были схематически изображены расположение поверхностных плазмонов. На рисунке 1.9а представлен общий вид расположения поверхностных плазмонов. Поверхностные плазмоны распределены в соответствии с их относительными концентрациями и предположением, что, в соответствии с плотностями электронов, плазмоны 4s формируются на ОЦК β -фазе, а плазмоны 1s, 2s, 3s на ГПУ α -фазе. Для детального представления приведен рисунок 1.9б. На изображениях плазмонов приведены графики с длинами и амплитудами волн колебания плазмонов.

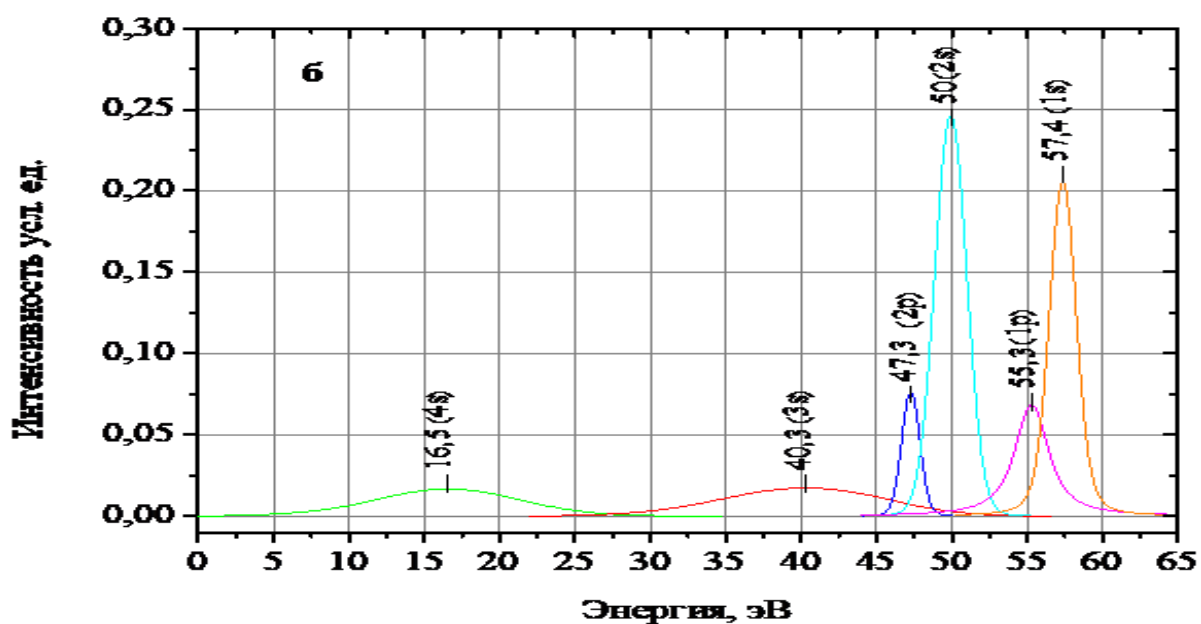
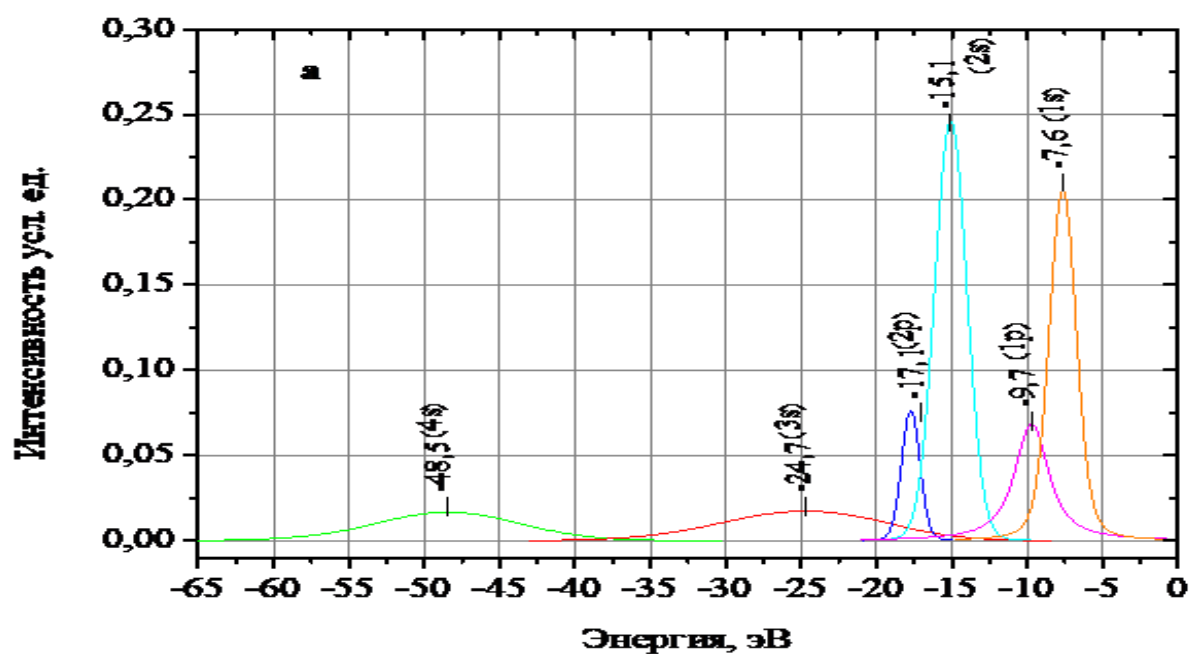


Рисунок 1.7а – спектры дискретных потерь энергии первичными электронами;
б – энергии плазмонов

Таблица 1.1 – Характеристики плазмонов

Исходный	Линии	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Энергия плазмона, эВ	16,5	40,3	47,3	50	55,4	57,4
	Плотность электронов, N_e , $см^{-3}$	3,95E23	2,36E24	1,62E24	3,63E24	2,23E24	4,78E24
	Плотность электронов, N_e , $нм^{-3}$	395,1	2357,2	1623,6	3628,5	2227,3	4781,9

	Плотность электронов, $Ne, \text{ нм}^{-2}$	53,8	177,1	138,1	236,1	170,6	283,8
	Плотность электронов, $Ne, \text{ нм}^{-1}$	7,3	13,3	11,8	15,4	13,1	16,9
	Плотность электронов, $Ne, \text{ в}$ $a=0,3232\text{ нм}$	2,4	4,3	3,8	5	4,2	5,5
	Интенсивности	0,21	0,24	0,12	0,66	0,26	0,5
	Нормированы на сумму	0,11	0,12	0,06	0,33	0,13	0,25
Деформированный	Линии	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Энергия плазмона, эВ	14,6	39,3	48,8	52,1	55,5	57,1
	Плотность электронов, $Ne, \text{ см}^{-3}$	3,1E23	2,24E24	1,73E24	3,94E24	2,23E24	4,73E24
	Плотность электронов, $Ne, \text{ нм}^{-3}$	309,4	2241,6	1728,2	3939,6	2235,3	4732,1
	Плотность электронов, $Ne, \text{ нм}^{-2}$	45,7	171,3	144,0	249,4	171,1	281,9
	Плотность электронов, $Ne, \text{ нм}^{-1}$	6,8	13,1	12,0	15,8	13,1	16,8
	Плотность электронов, $Ne, \text{ в}$ $a=0,3232\text{ нм}$	2,2	4,2	3,9	5,1	4,2	5,4
	Интенсивности	0,51	0,53	0,07	0,2	0,02	1,1
	Нормированы на сумму	0,21	0,22	0,03	0,08	0,008	0,45

Наряду с поверхностными плазмонами образуются объёмные плазмоны. Предполагая, что объёмный плазмон формируется при колебании электронного газа в трёх направлениях X, Y и Z, на рисунке 1.10 схематически представлены объёмные плазмоны, в соответствии с их относительными концентрациями, для наглядности поверхностные плазмоны не отображены. Величины относительных концентраций, объёмных плазмонов приведены в таблице 1.1, в соответствии с интенсивностями спектральных линий.

На рисунке 1.11 схематически изображены совместно объёмные и поверхностные плазмоны. Из рисунка следует, что поверхностные плазмоны экранируют рассеянные на объёмных плазмонах электроны, поэтому интенсивность линий на спектрах дискретного рассеяния будет зависеть, во-первых, от площади промежутков между поверхностными плазмонами.

Таблица 1.2 – Характеристики плазмонов

Исходный	Линии	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Энергия, эВ	16,5	40,3	47,3	50	55,36	57,4
	Частота плазмона, $f, \text{ Гц}$	4,0E15	9,78E15	1,15E16	1,2E16	1,34E16	1,4E16
	Длина волны плазмона $\lambda, \text{ нм}$	75,0	30,7	26,2	24,7	22,3	21,6
	Площадь плазмона, нм^2	5625	942,5	686,4	610,1	497,3	466,6
	Плотность электронов, $Ne, \text{ в}$ $a=0,3232\text{ нм}$	2,4	4,3	3,8	5	4,2	5,5
	Количество ячеек а на длину волны	232	95	81	76	69	67
	Нормированы на сумму	0,11	0,12	0,06	0,33	0,13	0,25

	Процент плазмонов(посчитан по интенсивности,отдельно для s и p)	0,13	0,15	0,32	0,41	0,68	0,31
	Площадь, занимаемая плазмонами на 10мкм^2 (пропорцион. % плазм.), нм^2	1,3E6	1,5E6		4,1E6		3,1E6
	Количество плазмонов в 10мкм^2 , шт.	231	1591,5		6720		6644
Деформированный	Линии	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Энергия, эВ	14,6	39,3	48,8	52,1	55,5	57,1
	Частота плазмона, f , Гц	3,54E15	9,53E15	1,18E16	1,26E16	1,35E16	1,38E16
	Длина волны плазмона λ , нм	84,8	31,5	25,4	23,8	22,3	21,7
	Площадь плазмона, нм^2	7191	992	645	566	497,3	471
	Плотность электронов, N_e , в $a=0,3232\text{нм}$	2,2	4,2	3,9	5,1	4,2	5,4
	Количество ячеек а на длину волны	262	97	79	74	69	67
	Нормированы на сумму	0,21	0,22	0,03	0,08	0,008	0,45
	Процент плазмонов(посчитан по интенсивности,отдельно для s и p)	0,22	0,23	0,79	0,08	0,21	0,47
	Площадь, занимаемая плазмонами на 10мкм^2 (пропорцион. % плазм.), нм^2	2,2E6	2,3E6		0,8E6		4,7E6
	Количество плазмонов в 10мкм^2 , шт.	306	2319		1413		9979

Плазмоны формируются на поверхности и в объёме преимущественно упорядоченных кристаллических решёток, поэтому площадь промежутков между поверхностными плазмонами буде зависеть от количества дефектов и ориентации зерен.

Во вторых, интенсивность рассеянных на объёмных плазмонах электронов зависит от изменения структуры кристаллической решётки.

Из таблицы 1.1 видно, что происходят значительные изменения формы дискретно рассеянных электронов от образца, подвергнутого поперечно винтовой прокатки при 1000°C . Следует учитывать ориентацию кристаллов.

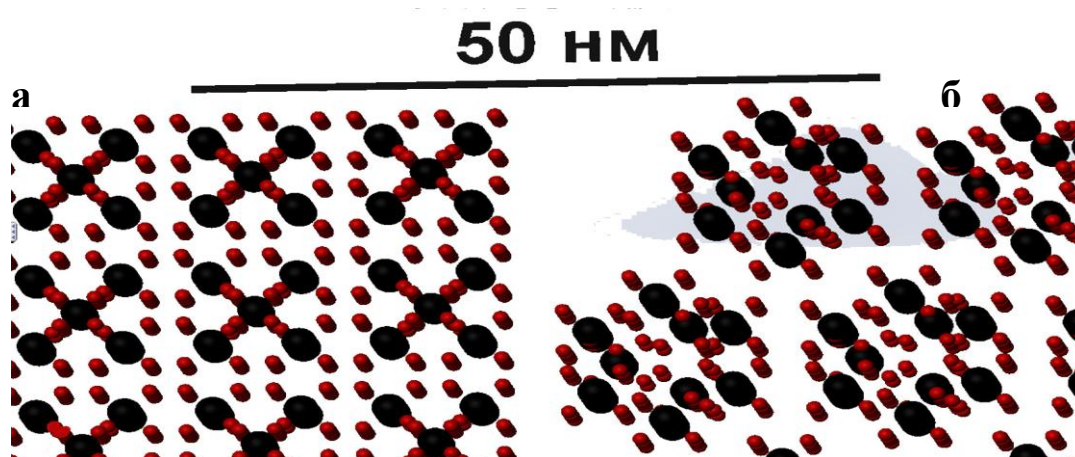


Рисунок 1.8 - Участки соседних зерен с ОЦК β -фазы (а) и ГПУ α -фазы (б), размеры элементарных ячеек, для наглядности, увеличены в 20 раз.

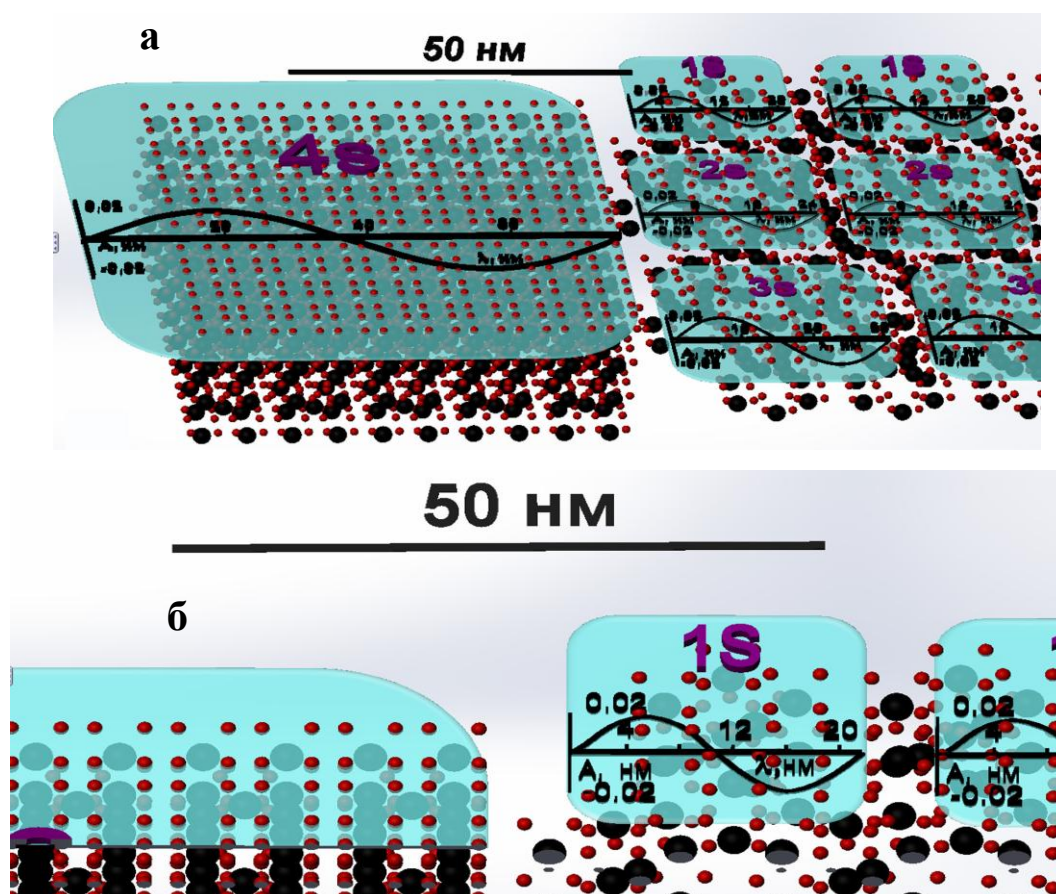


Рисунок 1.9 – Расположение поверхностных плазмонов, в соответствии с плотностью электронов, ОЦК – 4s, ГПУ – 1s, 2s, 3s. а) общий вид; б) – участок рисунка

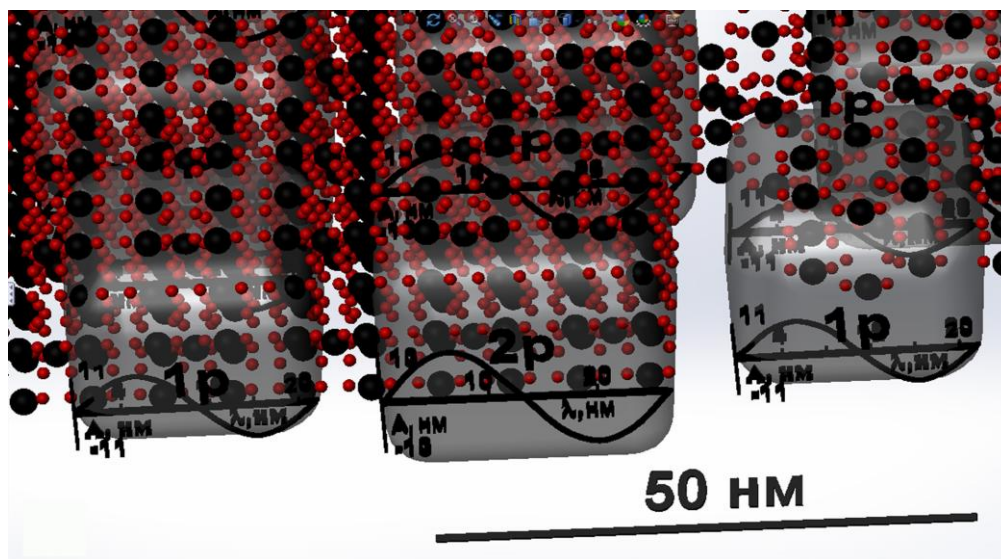


Рисунок 1.10 – Схематическое изображение объёмных плазмонов в ГПУ α -фазе, ОЦК β -фазе.

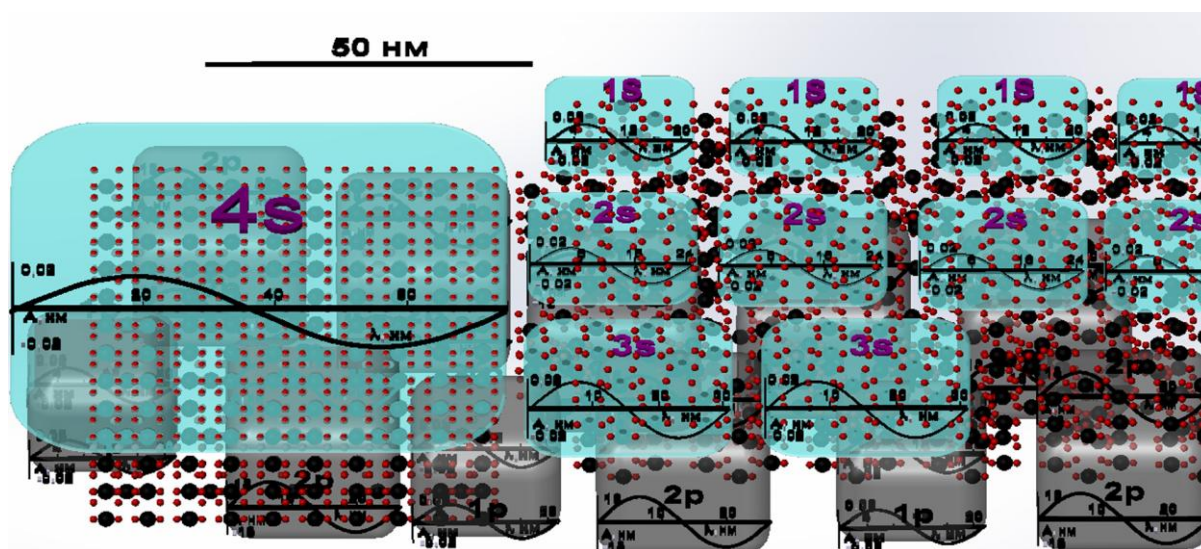


Рисунок 1.11 – Схематическое изображение объёмных и поверхностных плазмонов

В-третьих, интенсивность рассеянных на объёмных плазмонах электронов зависит от изменения зёрненной структуры. Из спектров таблицы 1.1 видно, что происходят значительные изменения формы спектров дискретно рассеянных электронов от образца, подвергнутого поперечно винтовой прокатки при 1000°C . Это, в том числе, может быть связано и с изменением формы зёрен при пластической деформации, как схематически показано на рисунке 1.12, удлинение $\delta[\%]$ составило 2100 [26]. На рисунке 1.13 приведены электронно-микроскопические изображения микроструктуры титанового сплава Ti-6Al-4V. Рисунок 1.13а сплав в состоянии поставки [26], α – фаза, темный оттенок, β – фаза, светлый. Рисунок 1.13 б,в – сплав Ti-6Al-4V, подвергнутый поперечно-винтовой прокатке при температуре 1000°C с последующей закалкой [22].

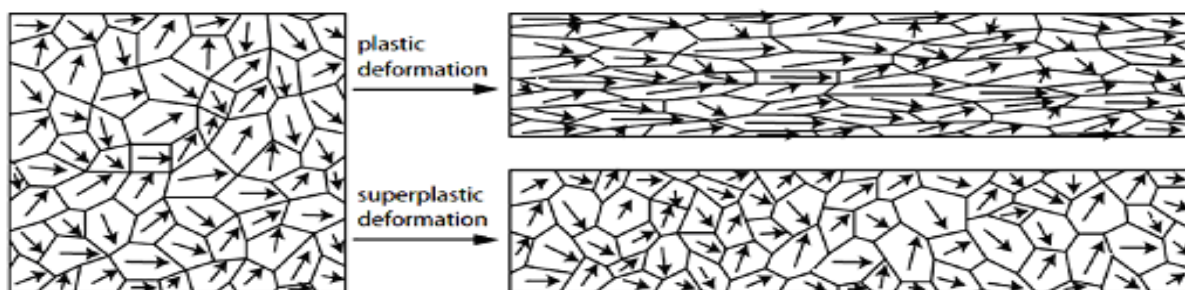


Рисунок 1.12 – Разница между пластической и сверхпластической деформацией в масштабе микрозёрен; стрелки указывают на ориентацию кристалла [26]

Из анализа рисунков следует, что в результате прокатки изменяется структура сплава. На рисунке 1.13б продемонстрировано удлинение зёрен и идентифицированы фазы. Тёмные полосы, это $\alpha+\beta$ титан, светлые полосы – α титан. На рисунке 1.13в с большим увеличением продемонстрировано сложное строение фазового состава, а это, в частности, подтверждает связь с изменением электронных спектров дискретно рассеянных электронов.

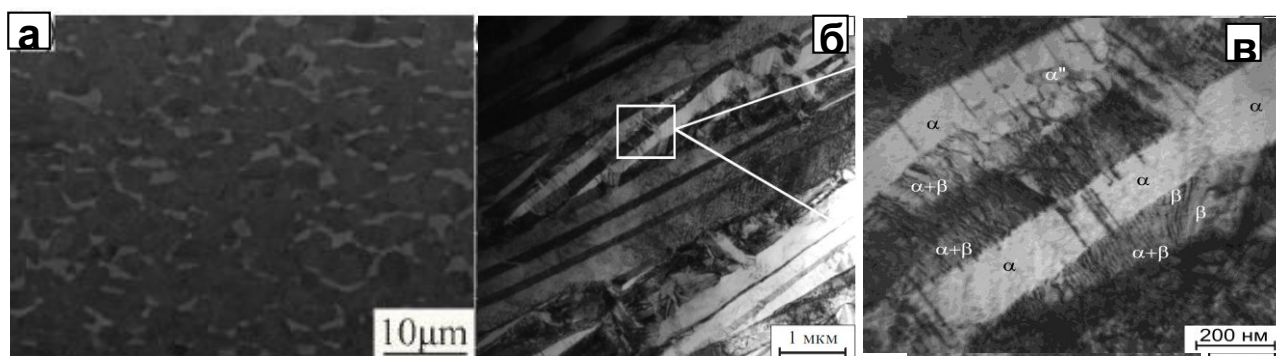


Рисунок 1.13 – Микроструктура (электронная микроскопия) титанового сплава Ti-6Al-4V: а) в исходном состоянии [26]; б, в) подвергнутого поперечно-винтовой прокатке при температуре 1000°С с последующей закалкой [22]

Величины, приведённые в таблицах 1.1 и 1.2, соответствуют возбужденным электронным состояниям. Для сравнения определим частоты колебаний и плотности электронов проводимости для сплава, находящегося в невозбуждённом состоянии. Однако неизвестна атомная плотность валентных электронов в сплаве Ti-6Al-4V. Химический состав сплава в % весовых: С до 0,1, Si до 0,15, N до 0,05, О до 0,2, Н до 0,015, Zr до 0,3, Ti 86,45 - 90,9, V 3,5 - 5,3, Al 5,3 – 6,8. Плотность 4,43г/см³. Для расчета выберем три основных элемента с высокой концентрацией - Al, Ti, V (среднюю сумму концентраций Al -6,1, Ti -89,5, V-4,4 приведём к 100%). Пересчитаем массовые проценты в атомные [21] и получим следующие значения: Ti – 85,7 Al – 10,4, V – 4,0. Титан имеет на внешних оболочках 3d² и 4s² два валентных электрона на s-орбитали внешнего слоя и два валентных электрона на d-орбитали предвнешнего слоя. Ванадий имеет на внешних оболочках 3d³ и 4s² два валентных электрона на s-орбитали внешнего слоя и три валентных электрона на d - орбитали предвнешнего слоя. Алюминий имеет на внешних оболочках 3s² и 3p¹ два валентных электрона на s-орбитали предвнешнего слоя и один валентный электрон на p-орбитали внешнего слоя.

Количество валентных электронов в титане и сплаве примерно одинаково. Плотности титана (α -4,51г/см³, β -4,32г/см³) и сплава 4,43г/см³. Зная относительную концентрацию основных элементов в сплаве Ti-6Al-4V и содержание электронов на внешних оболочках, можно принять плотность электронов проводимости в сплаве Ti-6Al-4V приблизительно равной плотности электронов проводимости в титане. Плотность валентных электронов в титане известна, $N_e = 4 \cdot 5,67 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3} = 22,68 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (на внешних оболочках титан имеет четыре электрона).

Валентные электроны, в не возбужденном состоянии колеблются с амплитудой, равной межуатомным расстояниям и частотой, в соответствии с (3.8), $f = 0,9 \cdot 10^4 \cdot (22,68 \cdot 10^{22})^{0,5} = 4,28 \text{ Е15 Гц}$, отсюда длина волны (3,10) $\lambda = 70,0 \text{ нм}$.

Исходить будем из того, что плотность валентных электронов в титане можно определить следующим образом: $5,67 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3} \cdot 4 = 22,68 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3} = 226,8 \text{ нм}^{-3}$, и таким образом, определить плотность валентных электронов в элементарной ячейке.

Параметр решётки сплава в исходном состоянии 0,3232нм [22], тогда плотность валентных электронов, в объёме элементарной ячейки ($a^3 = 0,0338 \text{ нм}^3$) – 7,67 штук, в площади элементарной ячейки ($a^2 = 0,1045 \text{ нм}^2$) – 3,9 штук, между атомами элементарной ячейки ($a = 0,3232 \text{ нм}$) – 2 штук.

Неизвестна атомная плотность валентных электронов в сплаве Ti-6Al-4V, но известна плотность валентных электронов в титане $N_e = 4 \cdot 5,67 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3} = 22,68 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (на внешних оболочках титан имеет четыре электрона). Для сравнения с титаном, определим плотность электронов проводимости для сплава ВТ6 (Ti-6Al-4V). Химический состав сплава в % весовых: С до 0,1, Si до 0,15, N до 0,05, О до 0,2, Н до 0,015, Zr до 0,3, Ti 86,45 - 90,9, V 3,5 - 5,3, Al 5,3 – 6,8. Плотность 4,43г/см³. Для расчета выберем три основных элемента с высокой концентрацией - Al, Ti, V (среднюю сумму концентраций Al -6,1, Ti - 89,5, V-4,4 приведём к 100%). Пересчитаем массовые проценты в атомные [21] и получим следующие значения: Ti – 85,7 Al – 10,4, V – 4,0. Титан имеет на

внешних оболочках $3d^2$ и $4s^2$ два валентных электрона на s-орбитали внешнего слоя и два валентных электрона на d-орбитали предвнешнего слоя. Ванадий имеет на внешних оболочках $3d^3$ и $4s^2$ два валентных электрона на s-орбитали внешнего слоя и три валентных электрона на d-орбитали предвнешнего слоя. Алюминий имеет на внешних оболочках $3s^2$ и $3p^1$ два валентных электрона на s-орбитали предвнешнего слоя и один валентный электрон на p-орбитали внешнего слоя [21].

Количество валентных электронов в титане и сплаве примерно одинаково. Плотности титана (α -4,51г/см³, β -4,32г/см³) и сплава 4,43г/см³. Зная относительную концентрацию основных элементов в сплаве Ti-6Al-4V и содержание электронов на внешних оболочках, можно принять плотность электронов проводимости в сплаве Ti-6Al-4V приблизительно равной плотности электронов проводимости в титане.

Валентные электроны, в не возбужденном состоянии колеблются с амплитудой, равной межатомным расстояниям и частотой, в соответствии с (3.8), $f = 0.9 \cdot 10^4 \cdot (22,68 \cdot 10^{22})^{0.5} = 4,28 \text{E}15 \text{Гц}$, отсюда длина волны равна $\lambda = 70,0 \text{нм}$ [21].

В заключении этого раздела, можно сказать, что проведенный обзор литературных источников позволил авторам выявить, наряду с хорошо проработанными теоретическими основами электронного строения твердого тела и механизмами вторично-электронной эмиссии, отсутствие процедур практического использования изменений энергетических уровней электронов зоны проводимости, валентной зоны, структурирования плазмонов и связи изменения энергии плазмонов с изменениями мезоскопических структурных состояний кристаллической решётки металлов и сплавов.

Таким образом, сформулирована задача использования нового способа регистрации вторично-электронных спектров и, на базе этого, создание методов исследования изменений электронно-энергетического строения твердого тела при модификации его термической обработка, деформацией, а также ионно-электронно- пучковыми потоками.

2 ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И УГЛОВЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ВЫХОДА УПРУГО И ДИСКРЕТНО РАССЕЯННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ ПОВЕРХНОСТИ ДЕФОРМИРОВАННОГО МЕТОДОМ ПОПЕРЕЧНО-ВИНТОВОЙ ПРОКАТКИ ПРИ 1000°C СПЛАВА Ti-6Al-4V

Любая модификация твердого тела (имплантация, термическая обработка, деформация, легирование) изменяются энергетические состояния электронов.

Это связано с пространственной трансформацией внешних электронных оболочек, при которой атомы меняют свое расположение в кристаллической структуре, изменяется химическое окружение атомов, деформируется кристаллическая структура, по сравнению с исходным состоянием. Известны работы [4, 5, 7, 10, 13, 20, 22, 27], посвященные выявлению зависимостей влияния модификации твердого тела на изменение формы спектров, вторичных электронов, включая упруго и дискретно рассеянные электроны, а также изменений этих спектров в зависимости от угла выхода вторичных электронов.

В данной работе ставилась задача выявления изменений электронной структуры сплава Ti-6Al-4V после поперечно-винтовой прокатки при температуре 1000°C, когда создается кривизна решетки и в ее зонах возникают межузельные мезоскопические структурные состояния. При температуре 1000°C межузельные наномасштабные мезоскопические структурные состояния s-p электронов алюминия увеличивают свою электронную плотность за счет d электронов атомов ванадия. Эта структурная трансформация означает, что d электроны ванадия будут участвовать в возрастании межатомной связи в α -фазе. В то же время ионы ванадия, объединяя свои d электроны с s-p электронами алюминия, дают сильное их рассеяние. Таким образом, введение атомов ванадия в α -фазу, с одной стороны, ее упрочняет и, с другой стороны, сильно рассеивает s-p электроны и ослабляет с ним связи. Это создает

уникальные условия, когда упрочнение материала сопровождается возрастанием его релаксационной активности.

2.1 Материалы и методы исследования

Исследуемые образцы имели размеры $5 \times 10 \times 1$ мм³ после разрушения при поперечно-винтовой прокатке при температуре 1000°C, когда весь материал имеет ОЦК-структуру, а легирующие элементы Al и V находятся в твердом растворе. Поперечно-винтовая прокатка создает в сплаве однородную кривизну кристаллической решетки, а в междоузлиях кривизны решетки — появление наномасштабных мезоскопических структурных состояний [22-32]. Поверхность шлифовалась и полировалась до шероховатости по $Ra = 0.05$ мкм и промывались с целью удаления загрязнений.

Спектры в форме $N(E)$ получены на модернизированном оже-спектрометре 09-ИОС-10 в ИФПМ СО РАН. Энергия электронов 3 кэВ. Площадь анализируемой поверхности 100×100 мкм². С целью исключения случайной погрешности регистрация спектров проводилась неоднократно, с перерывами в несколько дней. Спектры были получены как среднее из десяти. Погрешность отклонения формы и энергии спектров не превышала 1%.

В вакуумной камере образцы устанавливались рядом в одной плоскости, а регистрация спектров производилась в одно время и при одной настройке спектрометра. Перед регистрацией спектров поверхность образцов распылялась до атомарно чистой ионами Ar⁺ энергией 3 кэВ, падающими под углом 70° относительно нормали к поверхности. В процессе регистрации спектров с целью исключения адсорбции атомов из остаточной атмосферы распыление ионами продолжалось, но плотность тока снижалась до оптимальной. Давление в камере анализа поддерживалось на уровне 10^{-4} Па.

Оже-спектрометр 09 ИОС 10 оснащен энергоанализатором типа цилиндрическое зеркало. Анализатор этого типа состоит из двух коаксиальных

полых металлических цилиндров (рис. 2.1а). Во внутреннем цилиндре 2 имеются окна 5 и 6 для прохождения входящих и выходящих вторичных электронов соответственно.

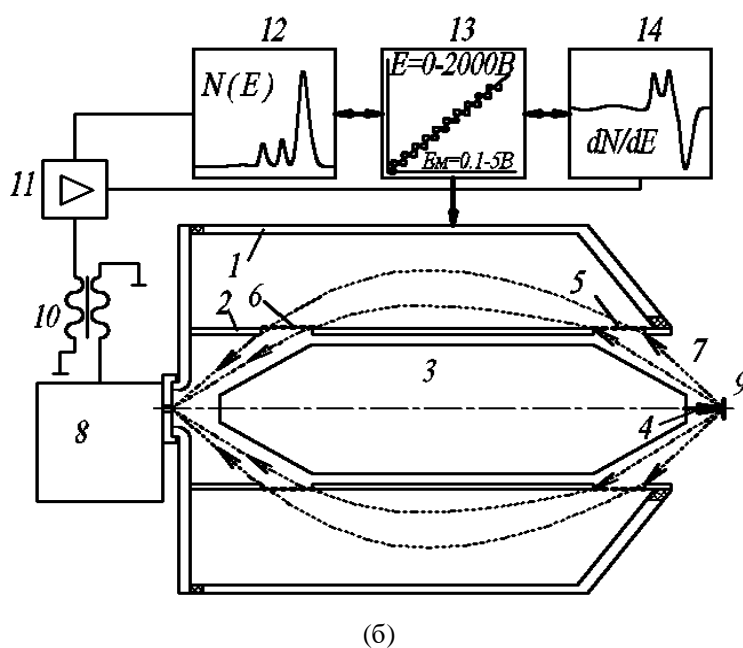
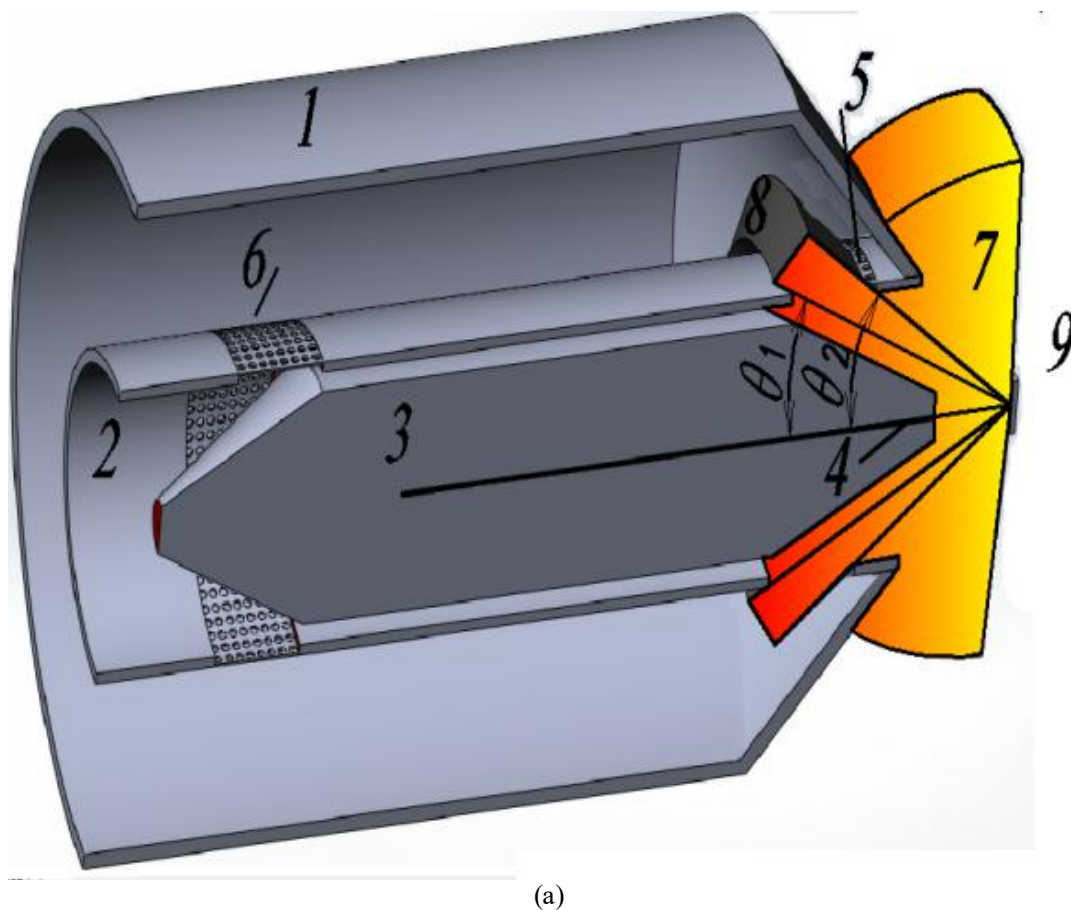


Рисунок 2.1 – Изображение механизма регистрации спектров упруго и дискретно рассеянных вторичных электронов: трехмерное изображение выхода

вторичных электронов 7 из поверхности образца 9 (а), схема регистрации упруго и дискретно рассеянных вторичных электронов (б)

К внешнему цилиндру 1 прикладывается отрицательное, по отношению к внутреннему цилиндру, изменяющееся напряжение 11 (рис. 2.1б), которое модулируется синусоидальным сигналом частотой f . Электронный пучок 4 энергией E_0 , формируемый источником электронов 3, инициирует вторичную электронную эмиссию 7 из приповерхностной области образца 9. Электроны, влетевшие в энергоанализатор с некоторой скоростью под углом влета θ , в результате отклонения от первоначальной траектории под действием электрического поля будут двигаться по криволинейной траектории и сфокусируются на выходе в точке, в которой располагается электронный умножитель 8. При этом образец 9 должен находиться также в фокусе анализатора, в данном случае на расстоянии 12 мм от торца внешнего цилиндра, при этом угол вылета вторичных электронов $\Delta\theta = \theta_1 - \theta_2$ составляет 10° . Одной из характеристик данного энергоанализатора является его разрешающая способность R . При определенной ширине щелей 5 и 6 анализатор будет пропускать электроны с угловым разбросом $\pm\Delta\theta$ и энергетическим разбросом ΔE . Две линии спектра равной интенсивности с некоторой средней энергией E считаются разрешенными, если при их наложении результирующая кривая имеет минимум. Отношение средней энергии этих линий к разнице между величинами энергий этих линий ΔE и определяет разрешающую способность анализатора: $R = E/\Delta E$.

Величина, обратная разрешающей способности анализатора, $\rho = 1/R$ называется относительным разрешением анализатора. В данном случае величина ρ составляла 0.2–0.5 %. Схема регистрации спектров в виде $N(E)$ и dN/dE приведена на рисунке 2.1б.

Высоковольтный модулированный сигнал с выхода вторичного электронного умножителя 8 поступает на разделительный трансформатор 10,

переменная составляющая сигнала частотой f с вторичной обмотки поступает на предварительный усилитель, а затем на системы выделения сигнала, где синхронно регистрируется в форме $N(E)$ и dN/dE .

2.2 Результаты исследования

На рис. 2.2 приведены спектры (среднее из пяти спектров) упруго и дискретно рассеянных электронов, зарегистрированных в форме $N(E)$ при энергии упругого рассеяния 980 эВ, образец находился в фокусе анализатора. Спектры отображены в двух видах: величины интенсивности при регистрации (рис. 2.2а) и нормированные на максимум упруго рассеянных электронов (рис. 2.2б). Следует отметить, что интенсивность спектров от образца в исходном состоянии ниже, чем после поперечно-винтовой прокатки. Это, скорее всего, связано с тем, что плотность электронов в деформированных образцах в зонах кривизны решетки выше исходных, а поэтому и потеря энергии первичными электронами выше примерно на 4.6 эВ. Для более детального анализа изменения спектров рассеяния экспериментальные спектры были преобразованы следующим образом:

- энергии пиков упруго рассеянных электронов были приведены к нулю (рис. 2.2);
- спектры были разложены на гауссианы, над каждым пиком обозначена величина энергии потерь (рис. 2.2);
- на рис. 2.3 отображены составляющие спектров дискретно рассеянных электронов;
- гауссианы были проинтегрированы, а результаты оформлены в виде таблицы, в которой сведены интенсивность, энергия пиков и потеря энергии составляющих спектров дискретно рассеянных электронов.

Из известных исследований [11, 13, 20] следует, что линия 0 соответствует упруго рассеянными электронам.

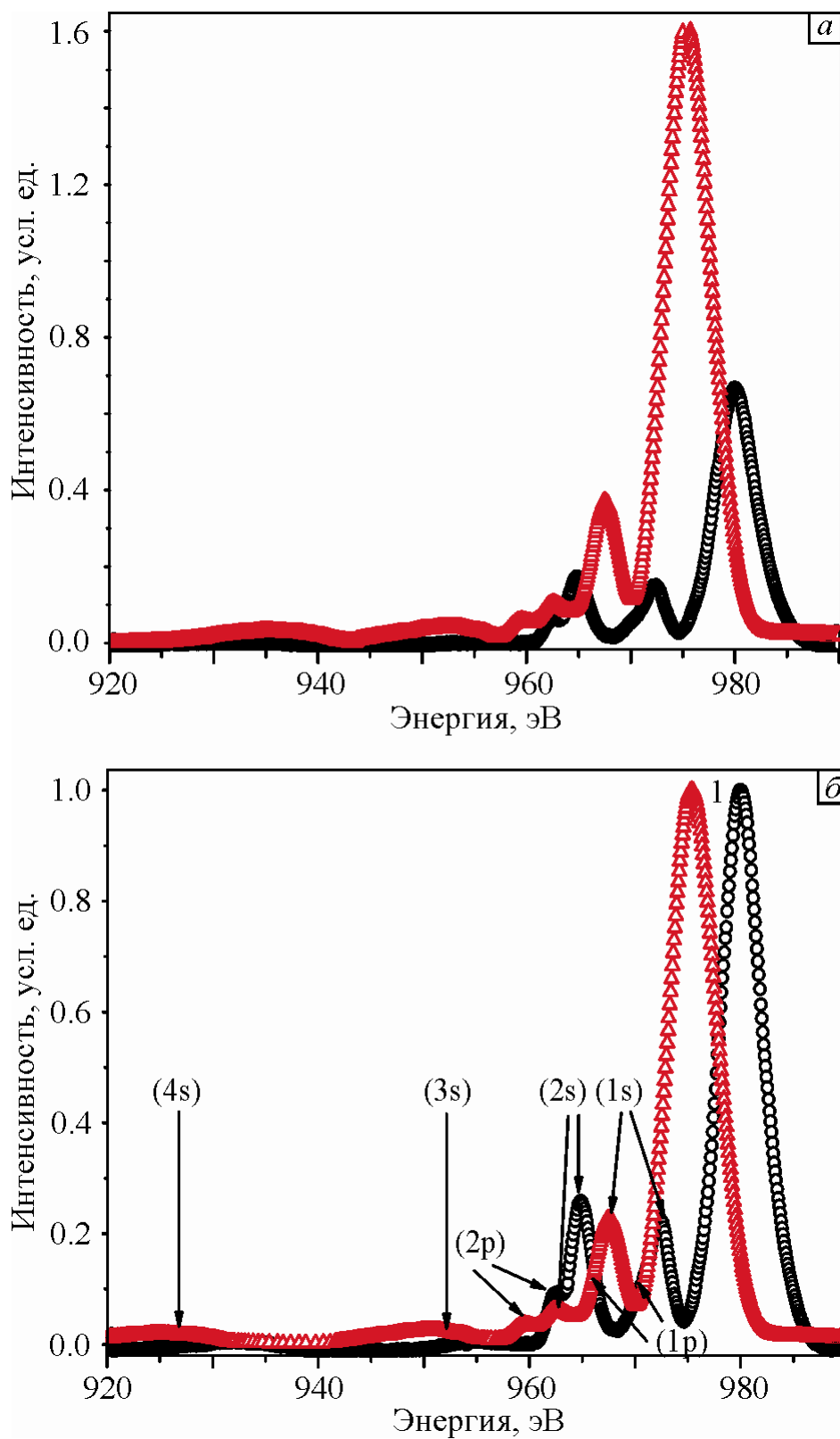


Рисунок 2.2 – Спектры упруго и дискретно рассеянных электронов при угле регистрации $\alpha = 33^\circ$ (фокус анализатора) из поверхности сплава Ti–6Al–4V: ненормированные (а) и нормированные на максимум упруго рассеянных

электронов (980 эВ) (б). ° - исходное состояние; Δ - подвергнутый поперечно-винтовой прокатке при 1000°C

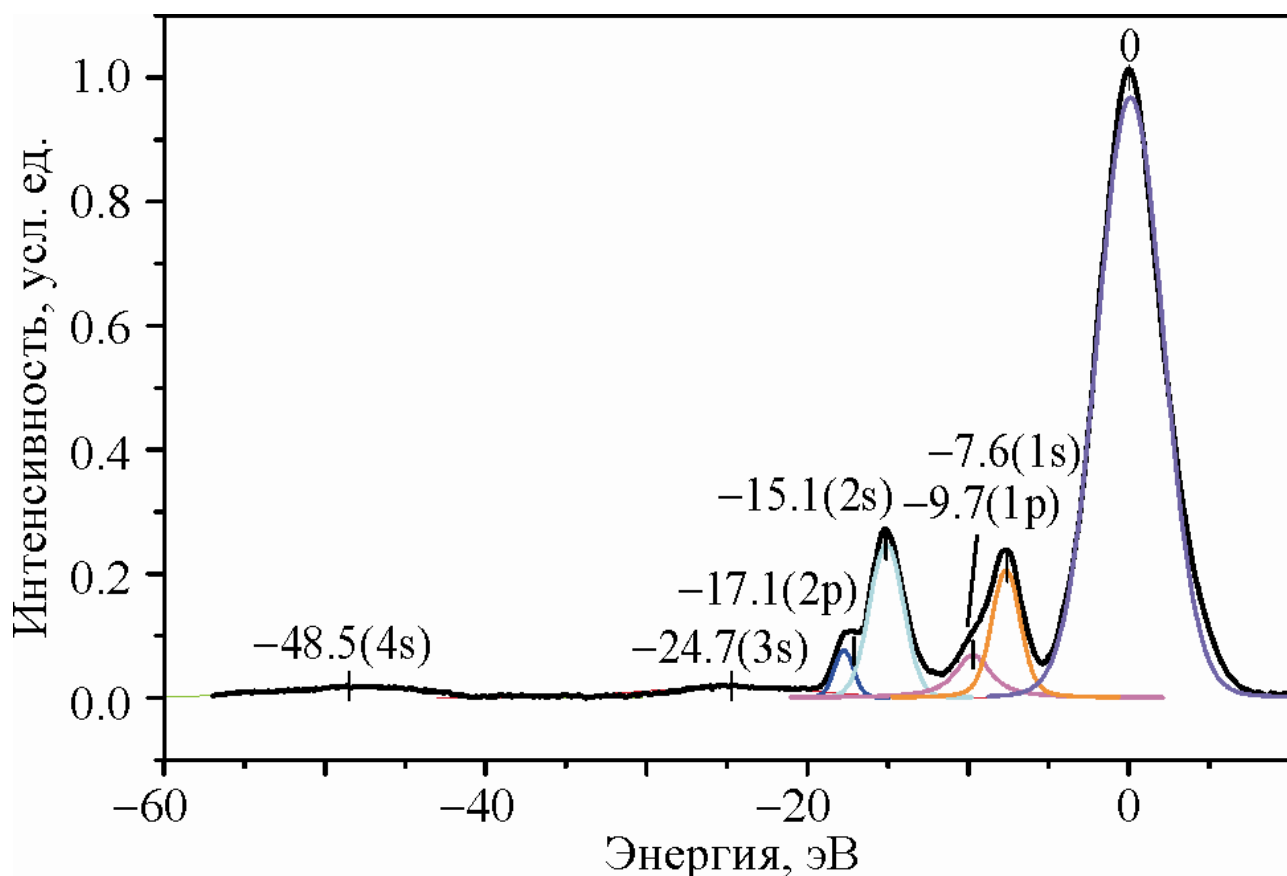


Рисунок 2.3 – Пример разложения на составляющие спектра упруго и дискретнорассеянных электронов (разложение спектра, представленного на рисунке 2.2)

Символами 1s, 2s, 3s, 4s обозначены линии спектров электронов, рассеявших энергию на возбуждение одного, двух, трех и четырех поверхностных плазмонов. Символами 1p, 2p обозначены линии спектров электронов, рассеявших энергию на возбуждение одного и двух объемных плазмонов. Из сопоставления результатов, приведенных на рисунке 2.4 и в таблице 2.1, следует, что происходит трансформация линий спектров, характеризующих потери энергии на объемных и поверхностных плазмонах, в деформированном образце, по сравнению с исходным.

Уже отмечалось выше, что интенсивность линий от деформированного образца больше по сравнению с исходным. Анализ интенсивностей линий после нормировки на сумму показывает, что увеличиваются интенсивности 1s, 3s и 4s, а другие интенсивности уменьшаются. Таким образом, можно сделать вывод, что при деформации происходит перестроение энергетических уровней электронов, а из-за этого изменяется величина рассеяния энергии на плазмонах.

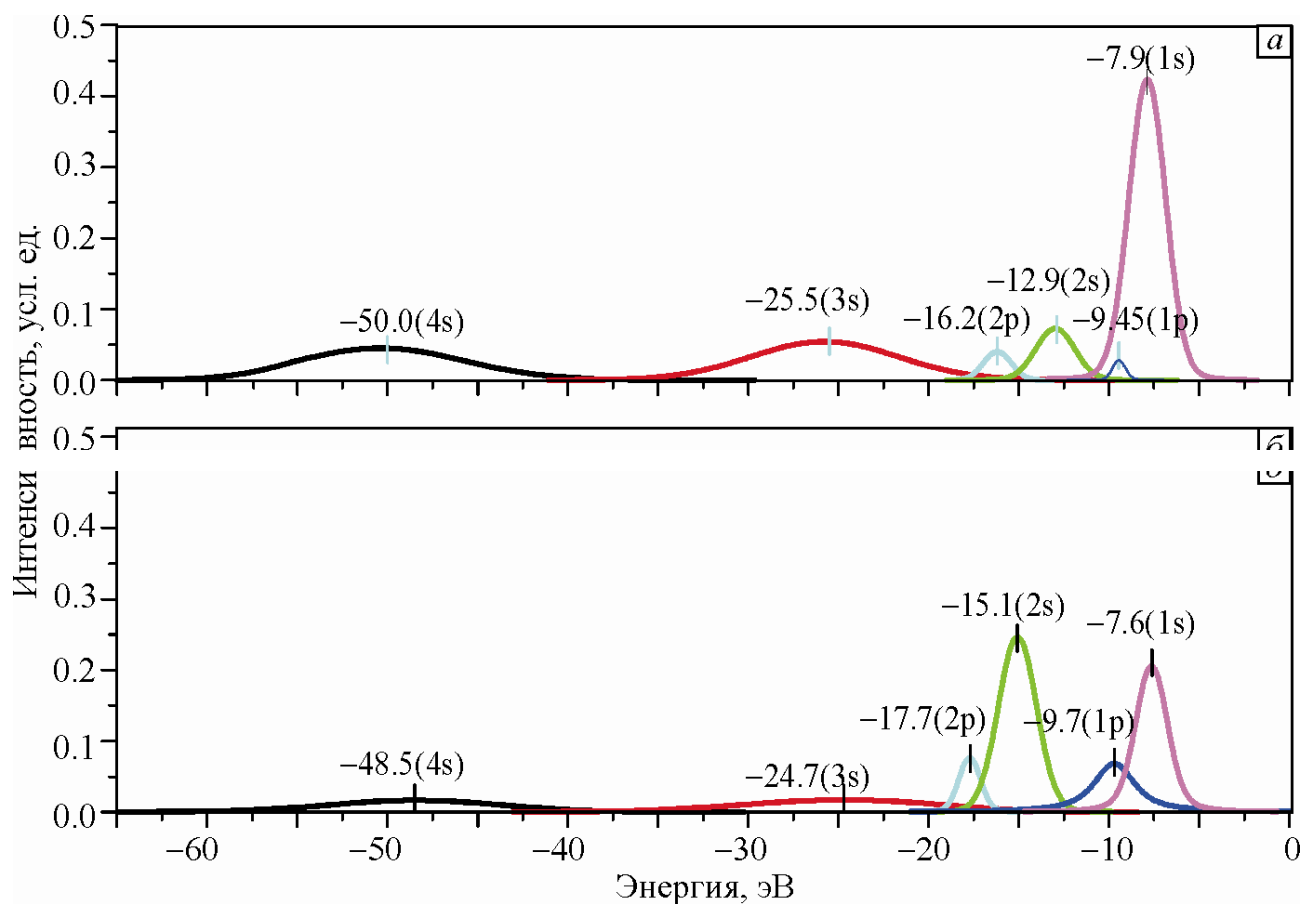


Рисунок 2.4 – Составляющие спектров дискретно рассеянных электронов (энергия упруго рассеянных электронов 730 эВ приведена к нулю, рисунок 2.3): исходное состояние Ti–6Al–4V, подвергнутый поперечно-винтовой прокатке при 1000°C

Таблица 2.1 – Интенсивность, энергия пиков и величина потери энергии составляющих спектров дискретно рассеянных электронов

Исходный	Линии	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Потеря энергии дискретно рассеянных электронов, эВ	48,5	24,7	17,7	15,1	9,7	7,6
	Интенсивность пиков	0,21	0,24	0,12	0,66	0,26	0,5
	Нормированы на сумму	0,11	0,12	0,06	0,33	0,13	0,25
Деформированный	Линии	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Потеря энергии дискретно рассеянных электронов, эВ	50,4	25,7	16,2	12,9	9,5	7,9
	Интенсивность пиков	0,51	0,53	0,07	0,2	0,02	1,1
	Нормированы на сумму	0,21	0,22	0,03	0,08	0,008	0,45

Как отмечалось выше, поперечно-винтовая прокатка при температуре 1000°C создает в зонах кривизны решетки множество межузельных мезоскопических структурных состояний, по которым частицы перемещаются с большими скоростями. Именно с этим эффектом связывается изменение интенсивности основных пиков электронных спектров на рис. 5 и в таблице в результате поперечно-винтовой прокатки при температуре 1000°C. Зависимости от угла выхода вторичных электронов (рис. 2.4) из поверхности сплава Ti–6Al–4V определялись из спектров (см. рис. 2.2а), регистрируемых при приближении образца 9 к фокусу анализатора, уменьшая расстояние до него с 12 до 4 мм (шаг регистрации составлял 0.1–0.3 мм). При этом изменение угла регистрации $\Delta\theta$ составило 22°.

Представленная на рис. 2.5 зависимость структуры электронных спектров от угла выхода из поверхности сплава хорошо согласуется с нашими представлениями о механизме поперечно-винтовой прокатки при $T = 1000^\circ\text{C}$. В исходном сплаве эта зависимость от угла выхода из поверхности сплава должна быть слабой, т.к. электронная структура сплава однородная (рис. 2.5а). Поперечно-винтовая прокатка при $T = 1000^\circ\text{C}$ создает очень неоднородную структуру электронного спектра. Поэтому если при малых углах выхода рассеянных электронов выявляется четкая структура спектра, то при увеличении углов выхода она быстро исчезает (рис. 2.5б).

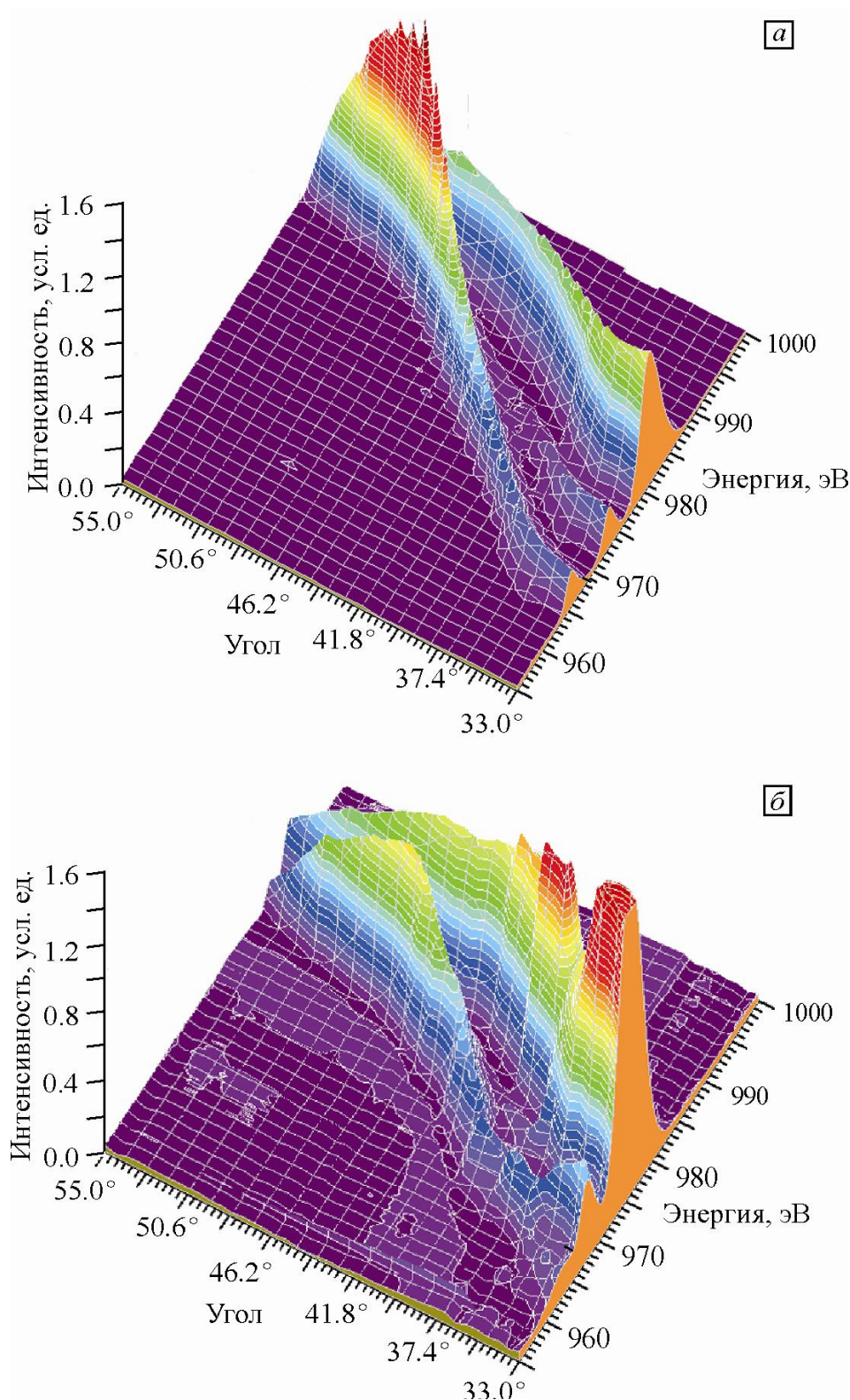


Рисунок 2.5 – Спектры упруго и дискретно рассеянных электронов в зависимости от угла выхода α поверхности сплава Ti–6Al–4V в исходном состоянии (а), подвергнутого поперечно-винтовой прокатке при 1000°C (б).

Энергия первичных электронов 980 эВ

На рис. 2.6 отображено сечение телесного угла, на котором производилась регистрация выхода упруго и дискретно рассеянных электронов, в зависимости от угла вылета из поверхности по схеме рис. 2.1а. На сечении расположены графики (рис. 2.2, 2.3) зависимостей от угла вылета интенсивности рассеяния энергии и изменения энергии на поверхностных $1s$ и объемных плазмонах $1p$ линии для исходного и деформированного сплава Ti–6Al–4V.

Результаты исследований (рис. 2.4–2.6) выявили значительное изменение спектров упруго и дискретно рассеянных электронов. Во-первых, интенсивности выхода электронов неравномерно распределены в облаке вторично-электронной эмиссии. Во-вторых, интенсивности выхода и энергии электронов из деформированного сплава отличаются от исходного состояния.

Таким образом, при деформации происходит перестроение энергетических уровней электронов, а из-за этого изменяется энергия плазмонов.

Это можно объяснить перестройкой кристаллической решетки при деформации, когда атомы меняют свое положение.

Обработка при $T = 1000^{\circ}\text{C}$ попе речно-винтовой прокаткой сильно уменьшает параметр решетки $a = 0.3191$ сплава, по сравнению с его значением в равновесном исходном состоянии $a = 0.3232$ [7]. Это означает, что фаза α' , содержащая избыточный ванадий, существенно упрочняет фазу. Механизм этого упрочнения будет рассмотрен далее.

Поперечно-винтовая прокатка сплава Ti–6Al–4V при $T = 1000^{\circ}\text{C}$ производится в структурном состоянии ОЦК β -фазы, когда легирующие элементы Al и V находятся в твердом растворе. При этом создается кривизна кристаллической решетки, в зонах которой появляются межузельные наномасштабные мезоскопические структурные состояния [28–32]. При закалке сплава, когда образуются α - и β -фазы, алюминий должен перейти в α -фазу, ванадий должен из нее выйти. Это не происходит.

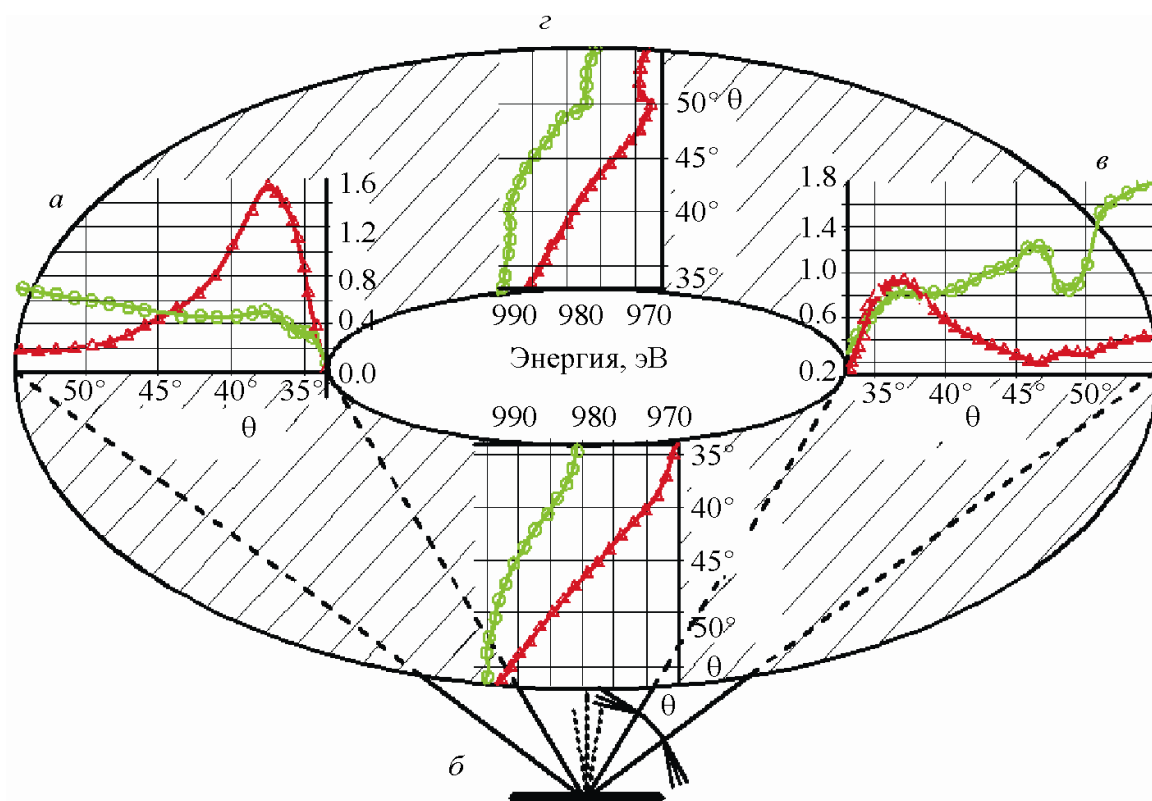


Рис. 2.6 – Сечение телесного угла θ , на котором производилась регистрация выхода упруго и дискретно рассеянных электронов в зависимости от угла вылета, по схеме рис. 1: интенсивность линий (рис. 3) 1s (\circ , зеленый цвет) и 1p (Δ , красный цвет) и энергия линий (рис. 2, 3) 2 (\circ , зеленый цвет) и 3 (Δ , красный цвет) для исходного (а, б) и деформированного (в, г) сплава Ti-6Al-4V

В сплаве создаются неравновесные фазы: в α -фазе сохраняется остаточный ванадий, а в β -фазе – остаточный алюминий. Резко возрастает ударная вязкость сплава при низких температурах. Для понимания этого эффекта очень важно знать изменение электронной подсистемы при создании неравновесных α - и β -фаз.

Исследование спектров дискретно-рассеянных электронов показало, что интенсивность неупруго рассеянных электронов в пиках 1s резко возросла. При этом резко упала интенсивность упруго рассеянных электронов в пиках 2s в деформированных образцах (рис. 2.2–2.4). Это означает, что электронные спектры неупругого рассеяния отражают изменения в основном в деформированных образцах во вновь образующейся α' -фазе, где сохраняется

остаточный ванадий. Наличие у атомов ванадия пространственных орбиталей d электронов сильно возмущает однофазный спектр α -фазы, в которой межатомные связи создаются s-p электронами, имеющими сферическую симметрию.

Наиболее вероятно, что избыточный ванадий распределяется в α -фазе в виде кластеров, вызывая сильное рассеивание ближайших s-p электронов. Поэтому пики 1s представляют собой в основном s-p электроны Al, рассеянные на плазмонах кластеров ванадия. Пики 2s — результат остаточного рассеивания s-p электронов на плазмонах, смежных с плазмонами кластеров ванадия. Это объясняет сильное возрастание низкотемпературной ударной вязкости сплава в кластерной структуре α -фазы. В то же время сильное рассеивание s-p электронов в зонах кривизны решетки α -фазы обеспечивает формирование релаксационных потоков, которые не смачивают кластеры атомов ванадия.

В качестве примера таких потоков приведем результаты [27, 33], где такое несмачивание хорошо выражено при низкотемпературном разрушении (рис. 2.7). Релаксационные потоки на рисунке 2.7 заслуживают особого внимания. Они связаны с зонами кривизны решетки, созданными во всем объеме материала поперечно-винтовой прокаткой при $T = 1000^\circ\text{C}$. Возникновение в междоузлиях новых структурных состояний приводит к двум эффектам. Во-первых, к увеличению в междоузлиях локальной плотности электронного газа. Поэтому зоны междоузлий становятся новыми плазмонами, которые будут излучать s-p электроны. Пик 1s, очевидно, связан с этими плазмонами. Поскольку межузельные плазмоны кривизны кристаллической решетки заполняют весь объем материала, интегральная величина пика 1s на рисунках 2.2–2.4 всегда очень большая.

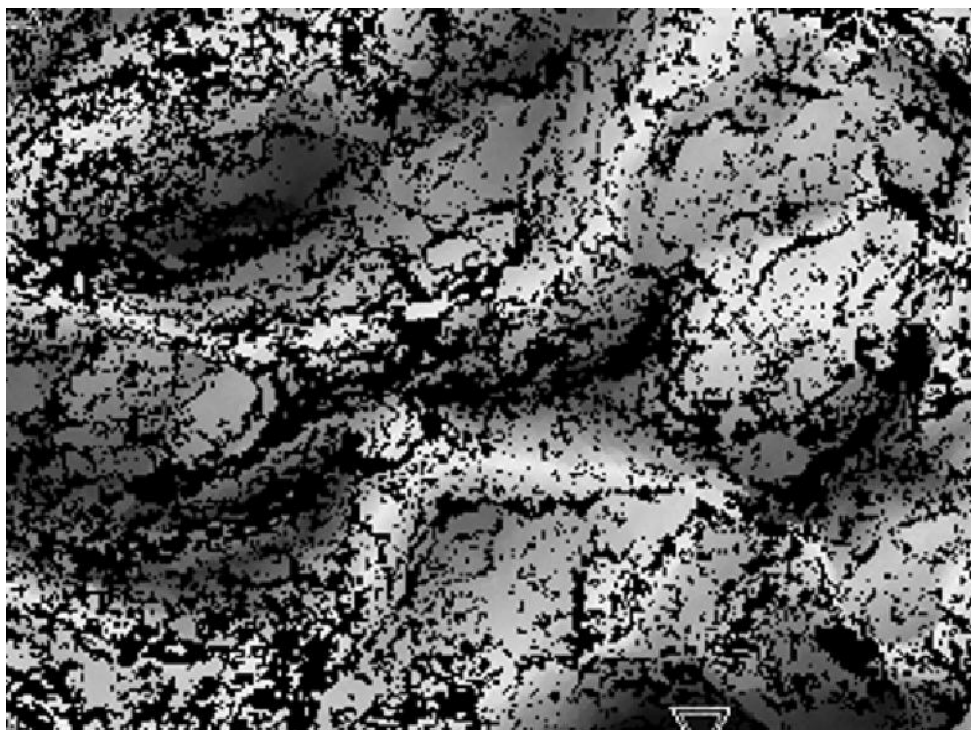


Рисунок 2.7 – Формирование релаксационных потоков лока лизованного пластического течения на поверхности ударного разрушения при $T = -70^{\circ}\text{C}$ после поперечно-винтовой прокатки сплава Ti–6Al–4V при $T = 1000^{\circ}\text{C}$

Наличие в материале плазмонов кластеров атомов ванадия резко усиливает эффект неравновесности межузельных мезоскопических структурных состояний.

Во-вторых, локальные увеличения плотности электронного газа в зонах кривизны решетки создают собственные плазмоны 3s и 4s. Они будут возрастать по мере увеличения степени деформации при поперечно-винтовой прокатке.

Возникновение избыточного электронного газа в межузельных зонах кривизны кристаллической решетки создает дополнительную движущую силу в различных кинетических процессах. В условиях ударного нагружения создаются релаксационные потоки, представленные на рисунке 2.7. В условиях статического нагружения происходит сверхпластическое течение и структурная турбулентность (рис. 2.8) [34].

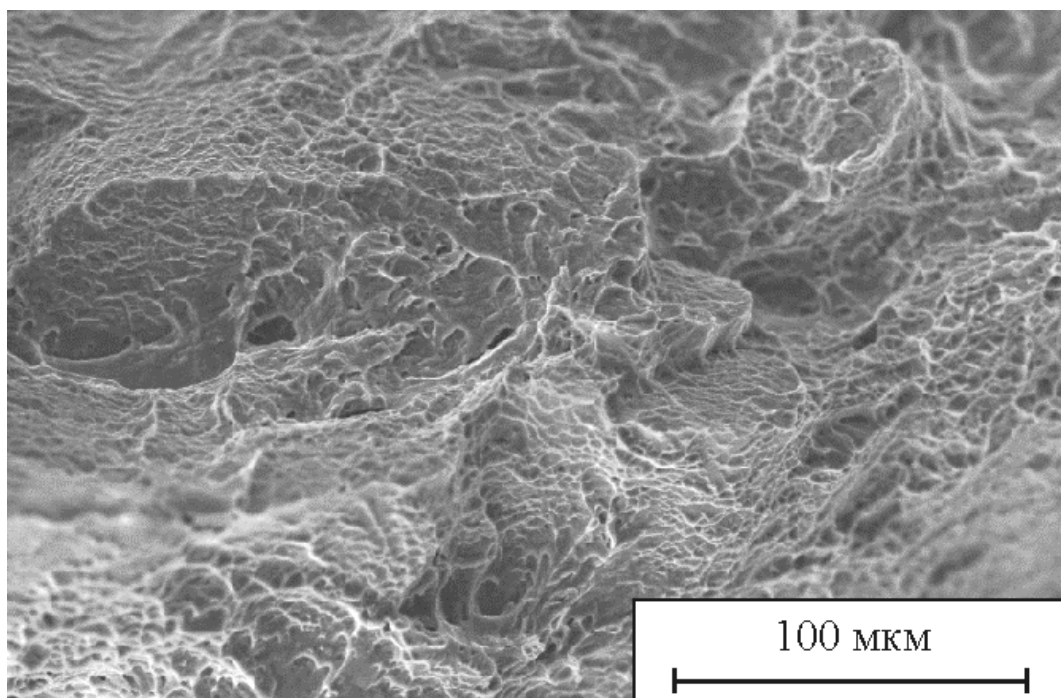


Рисунок 2.8 – Сплав Ti–6Al–4V после поперечно-винтовой прокатки при $T = 1000^{\circ}\text{C}$. Вихревая структура турбулентного течения при ударном разрушении при $T = -70^{\circ}\text{C}$

Но в литературе никто их не связывал с неоднородностью распределения электронного газа и возможностью проявления кулоновского взаимодействия. При учете кривизны кристаллической решетки это необходимо делать, т.к. кулоновское взаимодействие избыточного электронного газа в локальных зонах кривизны решетки создает свой вклад в движущую силу структурной трансформации. В работе [34] в неравновесном сплаве Ti–6Al–4V после поперечно-винтовой прокатки при $T = 1000^{\circ}\text{C}$ наблюдали все эффекты неравновесного поведения: сверхпластичность, высокую низкотемпературную ударную вязкость и структурную турбулентность. Но для их объяснения необходимо было исследование электронно-энергетических спектров. Это было сделано в настоящей работе.

На рис. 2.4 можно увидеть еще один очень важный результат: увеличение интенсивности рассеяния электронов в деформированных образцах в состояниях $3s$ и $4s$, связанных с s - p электронами алюминия. Возникновение

межузельных структурных состояний в результате поперечно-винтовой прокатки является дополнительным источником неупругого рассеяния электронов. Он проявляется в существенном возрастании пиков 3s и 4s. Это прямое подтверждение образования межузельных наномасштабных мезоскопических структурных состояний при поперечно-винтовой прокатке сплава Ti-6Al-4V.

Атомы остаточного алюминия в β -фазе, которая плотно укомплектована атомами ванадия, обуславливают небольшое неупругое рассеяние электронов, но мы их рассматривать не будем. Количественные характеристики изменения электронных спектров сплава при ударно-волновом нагружении представлены в таблице. Так, например, величина пика 2s, связанного с неупругим рассеянием электронов на структурных состояниях кластеров ванадия, уменьшается в 3 раза. Это связано с высоким неупругим рассеянием s-p электронов на кластерах ванадия, что увеличивает интенсивность релаксационных потоков в сплаве. Для решения задачи, поставленной в этой работе особо важна роль кулоновского взаимодействия электронов в условиях кривизны решетки. Созданная поперечно-винтовой прокаткой при $T = 1000^\circ\text{C}$ кривизна решетки обуславливает в сплаве очень неоднородное распределение электронного газа. При ударном нагружении в зонах кривизны решетки возникает сильное кулоновское отталкивание электронов. Именно это кулоновское отталкивание формирует в зонах кривизны решетки релаксационные потоки, которые могут распространяться в любых направлениях, как это показано на рисунке 2.7. Такие локализованные потоки возникают при измерении ударной вязкости, обуславливают сверхпластичность и структурную турбулентность при статическом нагружении (рисунок 2.8) [34]. Все это демонстрирует сплав Ti-6Al-4V, подвергнутый поперечно-винтовой прокатке при $T = 1000^\circ\text{C}$ и закаленный в неравновесном состоянии.

С эффектом кулоновского взаимодействия в электронном газе и влияния электрического поля на механическое поведение твердого тела мы уже сталкивались в литературе в условиях кривизны кристаллической решетки [35–

40]. При изготовлении тонколистового проката, когда возникает сильная кривизна решетки, в материале развиваются микротрещины. Проведение проката в условиях высокочастотного электрического поля исключает образование микротрещин. Этот эффект был обнаружен О.А. Троицким [35], но до сих пор не получил объяснения, т.к. высокочастотное электрическое поле влияния на подвижность дислокаций не оказывает. И это действительно так.

Но образование микротрещин в условиях кривизны решетки связано с кулоновским взаимодействием электронов и к подвижности дислокаций никакого отношения не имеет. В зонах кривизны решетки возникает семейство новых структурных состояний, но они не обязательно заняты. В них могут образовываться мартенситные фазы, однако, это как кулоновский релаксационный резерв. Если в зонах кривизны решетки возникают замкнутые мезообъемы, то они генерируют кулоновское отталкивание электронного газа и образование микротрещин.

Такой кулоновский релаксационный резерв создан в сплаве Ti–6Al–4V поперечно-винтовой прокаткой при $T = 1000^{\circ}\text{C}$, и затем он реализуется в сплаве повышением низкотемпературной ударной вязкости, проявлением сверхпластичности и структурной турбулентности. Обнаружение кулоновского релаксационного резерва — это принципиально новый эффект, который ранее в литературе не обсуждался. Его специфика состоит в том, что в нем принимает участие кулоновское отталкивание электронного газа. Межузельные мезоскопические структурные состояния характеризуются более плотным пространственным распределением атомов, чем распределение атомов в равновесной решетке с трансляционной инвариантностью. Поэтому межузельные наномасштабные мезоскопические структурные состояния нужно рассматривать как самостоятельную систему (самостоятельную фазу). Неудивительно, что исследование электронных спектров в сплаве Ti–6Al–4V после поперечно-винтовой прокатки при $T = 1000^{\circ}\text{C}$ в [22] показало самостоятельный электронно-энергетический спектр, связанный с межузельными наномасштабными мезоскопическими структурными

состояниями. Это объясняет возникновение потоков пластического течения, представленных на рисунке 2.7, возможность сверхпластического течения данной фазы, а также структурной турбулентности, представленной на рисунке 2.8. Кулоновский релаксационный резерв — это новая область пластического течения в условиях кривизны кристаллической решетки, который найдет широкое промышленное применение.

В заключении хотелось бы отметить, что в данной работе впервые представлены результаты исследования изменения спектров упруго и дискретно рассеянных электронов в сплаве Ti-6Al-4V, подвергнутом поперечно-винтовой прокатке при температуре 1000°C в сравнении с исходным состоянием. Выявленные в α -фазе плазмоны в s-p состояниях обнаружили ряд пиков высоких интенсивностей неупругого рассеяния.

Самый высокий пик неупругого рассеяния связан с образованием в α -фазе потоков высокоскоростных плазмонов. Рядом с этим пиком (1s) наблюдается пик 2s с сильной заниженностью неупругого рассеяния остаточных s-p электронов. При более высоких энергиях возникают пики (3s и 4s), которые отражают возникновение межузельных наномасштабных мезоскопических структурных состояний в ходе поперечно-винтовой прокатки и концентрации в них мартенситных фаз.

Участие d электронов ванадия в межатомных связях в α -фазе обеспечивают высокую низкотемпературную ударную вязкость сплава, а локальные потоки плазмонов в α -фазе развиваются в поле кулоновского взаимодействия свободных электронов, что обеспечивает высокие релаксационные характеристики подвижных плазмонов сплава.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
4БМ9И	Ботаева Лариса Борисовна

Школа	ИШНПТ	Отделение школы (НОЦ)	Материаловедение
Уровень образования	Высшее	Направление/специальность	Material Science

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Оклад руководителя – 50 615 руб. Оклад лаборанта (магистранта) – 12 664 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Премимальный коэффициент руководителя 30%; Доплаты и надбавки руководителя 30%; Доплаты и надбавки руководителя 30%; Дополнительной заработной платы 10%; Накладные расходы 30%; Районный коэффициент 1,3%.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды 27,1 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Определение потенциального потребителя результатов исследования, SWOT-анализ разработанной стратегии
2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Формирование плана и графика разработки: - определение структуры работ; - определение трудоемкости работ; Формирование бюджета затрат на научное исследование: - материальные затраты; - заработная плата (основная и дополнительная); - отчисления на социальные цели; - накладные расходы.
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Определение социальной и финансовой эффективности исследования

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов НТИ
2. Сегментирование рынка
3. Оценка конкурентоспособности технических решений
4. Матрица SWOT
5. График проведения и бюджет НТИ
6. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ
7. Потенциальные риски

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.04.2021
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	К.ф.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4БМ9И	Ботаева Лариса Борисовна		

3 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФ- ФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

3.1 Предпроектный анализ

3.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование [41].

Целевой рынок – создание новых материалов и технологий (научные исследования и разработки).

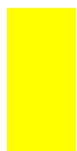
Сегмент рынка – организации в России и мире:

- научно-исследовательские организации (далее – НИИ);
- университеты (далее – вузы);
- производственные организации.

		Вид услуг по исследованию физико-химических свойств твердого тела			
		Элементный состав	Электронная структура	Фазовый состав	Изменения химического окружения атомов твердого тела
Тип потребителя	НИИ и вузы, оказывающие такие услуги: ИФПМ СР РАН, НИ ТПУ, СибГУ им. М.Ф. Решетнева, Институт катализа СО РАН				
	НИИ и вузы, заказывающие такие услуги: НИ ТГУ, ИСЭ СО РАН, ТГАСУ и др.				
	Производственные компании: АО «МИКРАН», АО «НИИПП» и др.				

Рисунок 3.1 – Карта сегментирования рынка услуг по исследованию физико-химических свойств твердого тела:

НИИ и вузы,
оказывающие
такие услуги



НИИ и вузы,
заказывающие
такие услуги



Производственные
организации,
заказывающие
такие услуги



3.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Примеры конкурентных решений по проведению исследований физико-химических свойств твердого тела.

Рассматриваемая в данной работе технология, позволяет проводить анализ электронной структуры материалов, что особенно актуально при оценке состояния материалов после любых видов деформации, упрочнения и других видов обработки.

В научно-исследовательских организациях регионов Сибирского федерального округа, в которых расположены научных центры Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск, г. Красноярск, г. Томск) существует оборудование и технологии для проведения исследований физико-химических свойств твердого тела, приобретенных у зарубежных производителей. Главное отличие томской технологии и уникальной установки состоит в возможности проводить анализ электронной структуры материалов.

- 1) К1. Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева – опорный университет Красноярского края;
- 2) К2. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук».

Таблица 3.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Повышение производительности труда пользователя	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
2. Помехоустойчивость	0,05	4	4	4	0,2	0,2	0,2
3. Энергоэкономичность	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
4. Надежность	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3

5. Уровень шума при работе установки (исследовательского оборудования)	0,1	4	3	3	0,4	0,3	0,3
6. Безопасность	0,1	5	5	5	0,5	0,5	0,5
7. Функциональная мощность (предоставляемые возможности)	0,1	5	3	3	0,5	0,3	0,3
8. Простота эксплуатации	0,05	3	3	3	0,15	0,15	0,15
9. Качество интеллектуального интерфейса	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
10. Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,1	5	5	5	0,5	0,5	0,5
Итого	1	45	39	37	3,65	3,55	3,45

Конкурентоспособность рассматриваемой в данной работе технологии составляет **3,65**.

Конкурентоспособность обусловлена отсутствием прямых конкурентов и уникальностью технологии.

3.1.3 SWOT-анализ

SWOT-анализ проекта «Исследование изменений электронной структуры атомов при деформации металлов и сплавов» представлен в таблице 3.2.

Таблица 3.2 – SWOT-анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	<p>С1. Уникальность технологии на российском и мировом уровнях.</p> <p>С2. Более низкая стоимость проведения исследований по сравнению с другими технологиями (методами).</p> <p>С3. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С4. Квалифицированные специалисты.</p> <p>С5. Наличие постоянного количества заказав на исследования.</p>	<p>Сл1. Отсутствие «научной школы» по этому направлению и необходимого количества молодых специалистов, которые смогут при необходимости самостоятельно работать на уникальном и сложном в управлении оборудовании (оже-спектрометре).</p> <p>Сл2. Отсутствие достаточного финансирования для более оперативного решения вопроса по замене</p>

		<p>вышедших из строя ключевых элементов оборудования.</p> <p>Сл3. Большой срок поставок материалов и комплектующих, используемых при проведении научного исследования.</p>
<p>Возможности:</p> <p>B1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>B2. Появление дополнительного спроса на услуги, сформированные на основе новой технологии.</p> <p>B3. Повышение стоимости конкурентных установок.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности»</p> <p>B1. Снижение стоимости исследования для потребителя.</p> <p>B2. Появление дополнительного спроса на новую технологию исследования.</p> <p>B3. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>B4. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности»</p> <p>B1. Отсутствие гранта РНФ в 2021 – 2022 годах, который позволит обновлять и производить техническую поддержку оборудования, составляющего основу технологии.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства в России.</p> <p>У2. Ограничения на экспорт и импорт технологий.</p> <p>У3. Введение дополнительных требований к международному сотрудничеству.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы»</p> <p>У1. Развитая конкуренция технологий производства</p> <p>У2. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы»</p> <p>У1. Продолжение коронавирусных ограничений, отсутствие возможности работать у возрастных сотрудников коллектива продолжительное время.</p> <p>У2. Отсутствие притока молодых кадров в научный коллектив разработчиков и исследователей.</p>

Анализ интерактивных таблиц можно представить в следующем виде:

Сильные стороны и возможности: B2B4C1C2.

Слабые стороны и возможности: B1У1Сл1.

Результаты SWOT-анализа будут учитываться при разработке плана дальнейшего развития проекта.

3.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На данный момент коллектив, работающий над созданием новых подходов к проведению исследований физико-химических свойств твердого тела, не планирует заниматься процессом коммерциализации, которая может заключаться в создании производства, создания нового бизнеса, привлечения средств инвесторов для развития этого направления, или расширения новых целевых групп потребителей.

При этом, на мой взгляд планировать данную работу возможно, с точки зрения выхода на потенциальных зарубежных потребителей данной технологии.

3.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Для данного вида проекта перспективными могут быть следующие методы коммерциализации научных разработок.

1. *Торговля патентными лицензиями*, т.е. передача третьим лицам права использования объектов интеллектуальной собственности на лицензионной основе. При этом в патентном законодательстве выделяющие виды лицензий: исключительные (простые), исключительные, полные лицензии, сублицензии, опционы.

2. *Передача ноу-хау*, т.е. предоставление владельцем ноу-хау возможности его использовать другим лицом, осуществляемое путем раскрытия ноу-хау.

Права на использование данной технологии располагает Институт физики прочности материаловедения СО РАН (наличие лаборатории, оборудования, кадров, публикаций). Принятие решения о возможности коммерциализации будет зависеть от традиционных методов решения подобных вопросов руководством института.

3.2 Инициация проекта

3.2.1 Цели и результат проекта

В данном разделе приведена информация о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей [41].

Под заинтересованными сторонами данного проекта понимаются организации, которые активно участвуют в проекте или интересы которых могут быть затронуты в результате реализации проекта. Это могут быть потенциальные потребители новой технологии. Информация по заинтересованным сторонам проекта представлена в табл. 3.3.

Таблица 3.3 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Вузы (НИ ТПУ и др.)	Возможность вуза обучения студентов с использованием уникальной технологии и оборудования
Научные организации (ИФПМ СО РАН и др.)	Привлечение дополнительного финансирования из внебюджетных источников, за счет предоставления услуг промышленным организациям

В таблице 3.4 представлена информация о иерархии целей проекта и критериях достижения целей. Цели проекта должны включать цели в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Таблица 3.4 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Целью проекта является исследование механизма изменений электронной структуры атомов в результате деформации металлов и сплавов с целью дальнейшего создания новой энергоэффективной технологии
----------------------	---

Ожидаемые результаты проекта:	Совокупность результатов исследования упругого и дискретного рассеяние электронов при вторичной электронно-электронной эмиссии в образце сплава Ti-6Al-4V, подвергнутого поперечно винтовой прокатки при 1000°C. Подготовка информации для подготовки не менее 5 публикаций в российских и зарубежных изданиях.
Критерии приемки результата проекта:	Опубликованные результаты проведенных исследований.
Требования к результату проекта:	Требование:
	Результаты исследования должны быть оформлены с использованием графических программ
	Наличие публикаций (статьи, тезисы) в соавторстве на русском и английском языке.

3.2.2 План проекта

В рамках планирования научного проекта построен календарный и сетевой графики проекта. Линейный график представляется в виде таблицы (табл. 3.5).

Таблица 3.5 – Календарный план проекта в рабочих днях

Код работ ы (из ИСР)	Название	Длительность, дни (рабочие)	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников*
1.	Определение цели, задач и конечных результатов проекта	22	01.09.2019	01.10.2019	Студент, Научный руководитель
2.	Определение основных этапов работ	23	02.10.2019	01.11.2019	Научный руководитель
3.	Проведение обзора российских и зарубежных источников	159	02.11.2019	30.06.2020	Студент
4.	Проведение экспериментальных исследований, обработка и обсуждение результатов. Принятие решений о публикации результатов	118	09.01.2020	30.06.2020	Студент, Научный руководитель
5.	Подготовка материалов для публикации	283	01.04.2020	01.06.2021	Студент
6.	Подготовка публикаций на русском и английском языке	283	01.04.2020	01.06.2021	Студент, Научный руководитель
7.	Подготовка и защита магистерской диссертации	92	01.02.2021	24.06.2021	Студент, Научный руководитель
И т о г о:		439 (без пересечений этапов)			

* Студент – Ботаева Л.Б. Научный руководитель – Клименов В.А.

3.3 Бюджет научного исследования (НТИ)

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения [41]. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям, представленным в таблице (табл. 3.6).

3.3.1 Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов)

В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для

выполнения работ по данной теме. Количество потребных материальных ценностей определяется по нормам расхода.

Таблица 3.6 – Группировка затрат по статьям

Вид работ	Статьи									
	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты, рублей	Специально оборудованное для научных (экспериментальных) работ, рублей	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Научные и производственные командировки	Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	Прочие прямые расходы	Накладные расходы, %	Итого плановая себестоимость, рублей
1.	4 990,86	17 352 350,00	1 718 924,17	171 892,41	558 994,14	-	-	-	567 244,97	20 374 396,55

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. В стоимость материальных затрат включают транспортно-заготовительные расходы (3 – 5 % от цены). В эту же статью включаются затраты на оформление документации (канцелярские принадлежности, тиражирование материалов). Результаты по данной статье заносятся в табл. 3.7.

Таблица 3.7 - Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Титановый сплав	BT6, пластина 0,5*0,5 м	1 кг	1 642,20	1 642,20
Бумага для офисной техники	A4, 1 пачка	1	398,00	398,00
Картридж для принтера	1 штука	1	500,00	500,00
Интернет	М/бит (пакет)	2	570,00	1140,00
Ежедневник	A4, 1 штука	1	77,00	77,00
Шариковая ручка	1 штука	1	30,00	30,00

Электроэнергия	кВт*ч	280	3,45	966,00
Всего за материалы				4 753,20
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				237,66
Итого по статье C_m				4 990,86

3.3.2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме. Определение стоимости спецоборудования производится по действующим прейскурантам, а в ряде случаев по договорной цене.

Таблица 3.8 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»*

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс.руб.	Общая стоимость оборудования, тыс.руб.
1.	Оже-спектрометр 09 ИОС 10	1	15 000,00	15 000,00
2.	Персональный компьютер	1	75,00	75,00
3	Установка программного обеспечения	1	14,00	14,00
4	Всего за материалы			15 089,00
5	Затраты по его доставке и монтажу в размере 15 % от его цены			2 263,35
	Итого по статье O			

При приобретении спецоборудования необходимо учесть затраты по его доставке и монтажу в размере 15 % от его цены. Стоимость оборудования, используемого при выполнении конкретного научного проекта и имеющегося в данной научно-технической организации, учитывается в виде амортизационных отчислений. Все расчеты по приобретению спецоборудования и оборудования,

имеющегося в организации, но используемого для выполнения конкретной темы, сводятся в таблице 3.8.

3.3.3. Основная заработная плата

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы (размер определяется Положением об оплате труда).

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

$$C_{зп} = З_{осн} + З_{доп}, \quad (3.1)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата;

$З_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($З_{осн}$) руководителя рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_{раб}, \quad (3.2)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (табл. 9);

$З_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (3.3)$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (табл. 3.9).

Таблица 3.9 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Лаборант
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	251

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (3.4)$$

где $Z_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, (определяется Положением об оплате труда);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: определяется Положением об оплате труда);

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Основная заработная плата руководителя (от ТПУ) рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы:

1) оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями, например, ассистент, ст. преподаватель, доцент, профессор. Базовый оклад Z_6 определяется исходя из размеров окладов, определенных штатным расписанием предприятия. Размер окладов ППС и НС ТПУ представлен на корпоративном портале ТПУ: <http://portal.tpu.ru/departments/otdel/peo/documents>. взять оклад за 2016 г. И умножить на 1,28. Для магистранта – 12 664 руб.

2) стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд, выполнение дополнительных обязанностей и т.д.

3) иные выплаты; районный коэффициент.

Расчёт основной заработной платы приведён в табл. 3.10.

Таблица 3.10 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Z_6 , руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	50 615	0,3	0,3	1,3	105 279,2	4 362,17	329	1 435 153,93
Лаборант (магистрант)	12 664	-	-	1,3	16 463,2	682,14	416	283 770,24
Итого:								1 718 924,17

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

В данную статью включается сумма выплат, предусмотренных законодательством о труде, например, оплата очередных и дополнительных отпусков; оплата времени, связанного с выполнением государственных и

общественных обязанностей; выплата вознаграждения за выслугу лет и т.п. (в среднем – 12 % от суммы основной заработной платы).

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} \quad (3.5)$$

где $З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

$З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

В табл. 3.11 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 3.11 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Лаборант
Основная зарплата	1 435 153,93	283 770,24
Дополнительная зарплата	143 515,39	28 377,02
Зарплата исполнителя	1 578 669,32	312 147,26
Итого по статье $C_{\text{зп}}$	1 890 816,58	

Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (3.6)$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Научные и производственные командировки

В эту статью включаются расходы по командировкам научного и производственного персонала, связанного с непосредственным выполнением конкретного проекта, величина которых принимается в размере 10% от

основной и дополнительной заработной платы всего персонала, занятого на выполнении данной темы.

Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями

На эту статью относится стоимость контрагентных работ, т.е. работ, выполненных сторонними организациями и предприятиями по заказу данной научно-технической организации, результаты которых используются в конкретном НТИ. Кроме того, на эту статью расходов относят оплату консультаций, использование Internet и т.д. Величина этих расходов определяется по договорным условиям.

Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации.

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (3.7)$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат составляется калькуляция плановой себестоимости НТИ (название темы) по форме, приведенной в табл. 16.

Прочие прямые затраты – эл.энерг. потреб. оборудованием. 5,8 руб за кВт

3.3.4 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. Информацию по данному разделу необходимо свести в таблицу (табл. 3.12).

Таблица 3.12 – Реестр рисков

№	Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска *
1	Нарушение сроков проекта	Потенциальные конкуренты усилят свои позиции	4	2	Средний
2	Отсутствие финансирования	Увеличение сроков выполнения проекта	4	5	Высокий
3	Смена работы исполнителем проекта	Увеличение сроков выполнения проекта	3	4	Низкий

Примечание: Уровень риска может быть: высокий, средний или низкий в зависимости от вероятности наступления и степени влияния риска. Риски с наибольшей вероятностью наступления и высокой степенью влияния будут иметь высокий уровень, риски же с наименьшей вероятностью наступления и низкой степенью влияния соответственно низкий уровень.

3.3.5 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования (табл. 3.14). Для этого

наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}}, \quad (3.8)$$

где I_{ϕ}^p - интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i-го варианта исполнения;

Φ_{\max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p, \quad (3.9)$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов; a_i – весовой коэффициент i-го параметра;

b_i^a , b_i^p – бальная оценка i-го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы, пример которой приведен ниже.

Таблица 3.13 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ ПО	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	5	3	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	4	2	3
3. Помехоустойчивость	0,15	5	3	3
4. Энергосбережение	0,20	4	3	3
5. Надежность	0,25	4	4	4
6. Материалоемкость	0,15	4	4	4
ИТОГО	1			1

$$I_{\text{ТП}} = 5 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,05 + 4 \cdot 0,01 = 3,94$$

$$\text{Аналог 1} = 3 \cdot 0,1 + 2 \cdot 0,15 + 3 \cdot 0,15 + 3 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,25 + 2 \cdot 0,05 + 4 \cdot 0,1 = 3,15$$

$$\text{Аналог 2} = 4 \cdot 0,1 + 3 \cdot 0,15 + 3 \cdot 0,15 + 3 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,25 + 4 \cdot 0,05 + 4 \cdot 0,1 = 3,5$$

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{\text{финр}}^p$) и аналога ($I_{\text{финр}}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p}, \quad I_{\text{финр}}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a} \quad \dots \quad (25)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^a} \quad (26)$$

где $\mathcal{E}_{\text{ср}}$ – сравнительная эффективность проекта; $I_{\text{мэ}}^p$ – интегральный показатель разработки; $I_{\text{мэ}}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 3.14 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Аналог	Разработк а
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,866	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,2	4,5
3	Интегральный показатель эффективности	4,2	4,5
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1/0,933	

Сравнив значения интегральных показателей эффективности можно сделать вывод, что реализация Разработки по сравнению с Аналогом является более эффективным вариантом решения задачи, поставленной в данной работе с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4БМ9И	Ботаева Лариса Борисовна

Школа	ИШНПТ	Отделение (НОЦ)	Отделение материаловедения
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	22.04.01 Material Science (Материаловедение)

Тема магистерской диссертации:

Исследование изменений электронной структуры атомов при деформации металлов и сплавов	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p>Объект исследования: сплав Ti-6Al-4V, подвергнутый поперечно винтовой прокатке при 1000°C.</p> <p>Область применения: один из наиболее часто используемых титановых сплавов, который применяется там, где необходимы малая плотность и высокая коррозионная стойкость, например, в аэрокосмической промышленности и медицине (имплантаты и протезы)</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>ГОСТ 12.2.049-80 ССБТ. Оборудование производственное.</p> <p>ГОСТ 12.2.033-78 Рабочее место при выполнении работ стоя</p> <p>«Трудовой кодекс Российской Федерации» от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 09.03.2021).</p>
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<p>ГОСТ 12.0.003-2015 ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация:</p> <p>1) вредные физические факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Повышенная температура воздуха рабочей зоны; <p>2) опасные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Взрывоопасные газы; • Пожаробезопасность; • Повышенная температура поверхностей оборудования и обрабатываемых материалов
3. Экологическая безопасность:	<ul style="list-style-type: none"> • Атмосфера выброс газа и результаты горения; • Гидросфера не испытывает

	загрязнения, поскольку не используются жидкости; <ul style="list-style-type: none"> • Литосфера загрязнение почвы хим. Веществами;
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<ul style="list-style-type: none"> • Возможными ЧС являются пожар в лаборатории, взрыв баллонов с газами, подающимися в печь для термической обработки; • Наиболее типичной ЧС является пожар в лаборатории

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	28.02.2021
---	-------------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Пашков Е. Н.	К.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4БМ9И	Ботаева Л.Б.		

4 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

4.1 Введение

В представленном разделе рассматривается проектирование рабочего места, формирование требований к рабочему помещению в соответствии с правилами санитарной, пожарной безопасности и охраны окружающей среды.

Проектирование рабочего места направлено на рациональный выбор сочетания рабочих элементов, обязанностей и задач работника, чтобы он достигал наилучших результатов и сам получал при этом чувство удовлетворения. Проектирование рабочего места заключается в разработке организационно технической документации (проекта, пояснительной записки, карт организации рабочих мест, чертежей), содержащей описание и характеристики его основных элементов и схему их расположения в пространстве.

Данная магистерская диссертация посвящена исследованию изменений электронной структуры атомов при деформации металлов и сплавов. Исходя из этого, рабочие процессы происходят в лабораторных помещениях. Рабочее место исследователя оснащено научным оборудованием, экспериментальной установкой, персональным компьютером и принтером для наиболее эффективной работы.

При проектировании рабочего места в помещении лаборатории необходимо учесть все вредные и опасные факторы проектирования производственной среды, такие, как микроклимат, шум, освещение, влияние электромагнитных полей и т.д. Также необходимо рассмотреть факторы электрической, пожарной и взрывной природы.

Так же при проектировании рабочего пространства необходимо учитывать возникновение чрезвычайных ситуаций и охрану окружающей среды.

4.2 Правовые и организационные меры обеспечения безопасности

4.2.1 Правовые нормы трудового законодательства

Основным документом, регулирующим трудовые отношения, является Трудовой Кодекс Российской Федерации. Данный документ устанавливает права и обязанности работника и работодателя, регулирует вопросы охраны труда, профподготовки, переподготовки и повышения квалификации, трудоустройства, социального партнерства. В нем находятся правила оплаты и нормирования труда, порядок разрешения трудовых споров. Так же права на отдых, включая ограничение рабочего времени, предоставление ежедневного отдыха, выходных и нерабочих праздничных дней, оплачиваемого ежегодного отпуска.

Нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю. В течение рабочего дня (смены) работнику должен быть предоставлен перерыв для отдыха и питания продолжительностью не более двух часов и не менее 30 минут, который в рабочее время не включается.

Всем работникам предоставляются выходные дни (еженедельный непрерывный отдых). При пятидневной рабочей неделе работникам предоставляются два выходных дня в неделю, при шестидневной рабочей неделе - один выходной день. Всем работникам должен предоставляться ежегодный основной оплачиваемый отпуск продолжительностью 28 календарных дней.

Всем работникам организации должна выплачиваться заработная плата своевременно и в полном размере не ниже установленного минимального размера. Минимальный размер оплаты труда устанавливается одновременно на всей территории Российской Федерации федеральным законом и не может быть ниже величины прожиточного минимума трудоспособного населения. Задержка выплат может осуществляться только в случаях, предусмотренных в ТК РФ ст. 137 [42].

4.2.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочего места

Исследование в данной работе проводится в лабораторном помещении. Исходя из этого особое внимание следует уделить требованиям к работе исследователя на месте.

На данное рабочее место распространяются требования ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования. Конструкция рабочего места и взаимное расположение всех его элементов (сиденье, органы управления, средства отображения информации и т.д.) должны соответствовать антропометрическим, физиологическим и психологическим требованиям, а также характеру работы [43]. Рабочее место должно быть оснащено ПЭВМ. Таким образом, рабочие места с использованием ПЭВМ должны соответствовать требованиям СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы». Согласно данному документу площадь на одно рабочее место пользователей ПЭВМ должна составлять не менее 6 м². Высота рабочей поверхности стола для взрослых пользователей должна регулироваться в пределах 680-800 мм; при отсутствии такой возможности высота рабочей поверхности стола должна составлять 725 мм. Рабочий стол должен иметь пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной - не менее 500 мм, глубиной на уровне колен - не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног - не менее 650 мм. Конструкция рабочего стола должна обеспечивать оптимальное размещение на рабочей поверхности используемого оборудования с учетом его количества и конструктивных особенностей, характера выполняемой работы. Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращенного к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы.

При размещении рабочих мест с ПЭВМ расстояние между рабочими столами с видеомониторами, должно быть не менее 2,0 м, а расстояние между боковыми поверхностями видеомониторов - не менее 1,2 м. Экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на расстоянии 600-700 мм, но не ближе 500 мм с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов.

Помещения, где размещаются рабочие места с ПЭВМ, должны быть оборудованы защитным заземлением в соответствии с техническими требованиями по эксплуатации. Не следует размещать рабочие места с ПЭВМ вблизи силовых кабелей и вводов, высоковольтных трансформаторов, технологического оборудования, создающего помехи в работе ПЭВМ [44].

4.3 Производственная безопасность

Для идентификации потенциальных факторов необходимо использовать ГОСТ 12.0.003–2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация» [45].

Перечень опасных и вредных факторов, характерных для рабочей среды представлен в таблице 1.

Таблица 4.1 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ		Нормативные документы
	Разработка	Внедрение	
1.Отклонение показателей микроклимата	+	+	СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [46].
2.Превышение уровня шума	+	+	СН 2.2.4/2.1.8.562-96 Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки. Санитарные нормы [47]. ГОСТ 12.1.003-2014 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования

			безопасности (Переиздание) [48]. ГОСТ 12.1.029-80 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства и методы защиты от шума. Классификация [49].
3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	СНиП 23-05-95* Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1) [50]. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03 Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий [51].
5. Электрическая безопасность	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы [44]. ГОСТ Р 12.1.019-2009 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты [51].
6. Пожарная безопасность	+	+	Федеральный закон от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» [52].

4.3.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований

1) Отклонение показателей микроклимата

Показателями, характеризующими микроклимат в производственных помещениях, являются: температура воздуха, температура поверхностей, относительная влажность воздуха, скорость движения воздуха, интенсивность теплового облучения.

Согласно СанПиН 2.2.4.548–96 при нормировании условий труда выделяется холодный период года данный период года, характеризуется среднесуточной температурой наружного воздуха, равной +10°C и ниже, теплый период года данный период года, характеризуется среднесуточной температурой наружного воздуха выше +10°C. Разграничение работ по категориям осуществляется на основе интенсивности общих энергозатрат организма в ккал/ч (Вт).

Исследователь исходя из характеристики отдельных категорий работ СанПиН 2.2.4.548–96 относится к категории Ia работы с интенсивностью

энергозатрат до 120 ккал/ч (до 139 Вт), производимые сидя и сопровождающиеся незначительным физическим напряжением [46].

Оптимальные параметры микроклимата на таких рабочих местах должны соответствовать значениям, приведенным в таблице 2, а в таблице 3 допустимые.

Таблица 4.2 - Оптимальные величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений [46]

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	Ia (до 139)	22-24	21-25	60-40	0,1
Теплый	Ia (до 139)	23-25	22-26	60-40	0,1

Таблица 4.3 - Допустимые величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений [46]

Период года	Категория работ по уровню энергозатрат, Вт	Температура воздуха, °С		Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с	
		диапазон ниже оптимальных величин	диапазон выше оптимальных величин			для диапазона температур воздуха ниже оптимальных величин, не более	для диапазона температур воздуха выше оптимальных величин, не более
Холодный	Ia (до 139)	20,0-21,9	24,1-25,0	19,0-26,0	15-75*	0,1	0,1
Теплый	Ia (до 139)	21,0-22,9	25,1-28,0	20,0-29,0	15-75*	0,1	0,2

Нормализация микроклимата производственных помещений осуществляется путем проведения следующих мероприятий:

- оборудование зданий и помещений системами обогрева;

- обеспечение системой кондиционирования;
- использование увлажнителей воздуха;
- воздушное душирование рабочих мест;
- систематическая влажная уборка рабочего помещения.

2) Превышение уровня шума

Шум на рабочем месте оказывает раздражающее влияние на работника, повышает его утомляемость, а при выполнении задач, требующих внимания и сосредоточенности, способен привести к росту ошибок и увеличению продолжительности выполнения задания [47].

Источниками шума в лаборатории могут служить исследовательское оборудование, компьютерная техника, система вентиляции и кондиционирования, а также шум проникающий из вне.

Согласно СН 2.2.4/2.1.8.562-96 при работе с ПЭВМ допустимый уровень шума, оказываемого на менеджера должен не превышать 80 дБА [48].

С целью снижения уровня шума применяются следующие меры по коллективной защите:

- применение при строительстве и реконструкции производственных зданий звукоизоляции и звукопоглощающих конструкций;
- уплотнение по периметру притворов окон, дверей;
- укрытия и кожухи для источников шума;
- использование звукопоглощающих материалов;
- использование материалов и конструкций, препятствующих распространению шума;
- оптимальное размещение шумных машин, позволяющее минимизировать воздействие шума на рабочем месте [49].

3) Недостаточная освещенность рабочей зоны

Согласно СНиП 23-05-95 недостаточная освещенность рабочей зоны является вредным производственным фактором, который может вызвать

ослепление или привести к быстрому утомлению и снижению работоспособности.

Освещение должно включать в себя как естественное, так и искусственное освещение. В качестве источников искусственного освещения следует применять преимущественно люминесцентные лампы типа ЛБ.

При выполнении работ категории высокой зрительной точности (наименьший размер объекта различения 0,3...0,5мм) величина коэффициента естественного освещения (КЕО) должна быть не ниже 1,5%, а при зрительной работе средней точности (наименьший размер объекта различения 0,5...1,0 мм) КЕО должен быть не ниже 1,0%, согласно СНиП 23-05-95 [50].

Требования к освещенности в помещениях, где установлены лабораторные установки и компьютеры, следующие: при выполнении зрительных работ высокой точности 73 общая освещенность должна составлять 300 лк, а комбинированная – 750 лк; аналогичные требования при выполнении работ средней точности - 200 и 300 лк, согласно СНиП 23-05-95 [50]. Нормируемые показатели естественного, искусственного и совмещенного освещения в офисном помещении устанавливаются нормами СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03 и приведены в таблице 4 [51].

Таблица 4.4 - Нормируемые показатели естественного, искусственного и совмещенного освещения общественного здания [51]

Помещение	Рабочая поверхность и плоскость нормирования КЕО и освещенности и высота плоскости над столом, м	Естественное освещение		Совмещенное освещение		Искусственное освещение		
		КЕО η , %		КЕО η , %		Освещенность рабочих поверхностей, лк	Показатель дискомфорта М, не более	Коэффициент пульсации и освещенности, КП, %, не более
		При верхнем или комбинированном освещении	При боковом освещении	При верхнем или комбинированном освещении	При боковом освещении			
Лаборатория	Г-0,8	3,0	1,0	1,8	0,6	300	40	15

4.4 Электрическая безопасность

Основная часть работы исследователя выполняется с использованием лабораторной и компьютерной техники. Использование данного оборудования может привести к наличию таких вредных факторов, как повышенный уровень статического электричества, повышенный уровень электромагнитных полей, повышенная напряженность электрического поля.

Регламентирующим документом в этом случае является СанПиН 2.2.2/2.4.1340–03 «Гигиенические требования к электронно–вычислительным машинам и организации работ», требованиям которого соответствуют ПЭВМ.

Допустимые уровни электромагнитных полей (ЭМП), создаваемых ЭВМ, не превышают значений, представленных в таблице 5.

Таблица 4.5 - Допустимые уровни ЭМП, создаваемых ЭВМ [43]

Наименование параметров	Диапазон	ДУ ЭМП
Напряженность электрического поля	в диапазоне частот 5 Гц – 2 кГц	25 В/м
	в диапазоне частот 2 кГц – 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	в диапазоне частот 5 Гц – 2 кГц	50 нТл
	в диапазоне частот 2 кГц – 400 кГц	25 нТл
Напряженность электрического поля		15 кВ/м

Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты, в организации применяют следующие средства и методы защиты:

- использование электрической изоляции токоведущих частей (сопротивление изоляции должно быть не менее 0,5 МОм);
- ограничение доступа к токоведущим частям, которые работают под напряжением;
- использование малых напряжений;
- защитное заземление и зануление;
- защитное экранирование;

- автоматическое отключение;
- применение средств индивидуальной защиты;
- инструктаж персонала и соблюдение инструкций по технике безопасности на рабочем месте;
- знаки и плакаты безопасности [10].

4.5 Экологическая безопасность

В процессе проведения исследований негативное влияние на атмосферу и гидросферу не происходит. Влияние в данном случае приходится на литосферу в виде отходов. В данной работе отходами будут считаться макулатура, офисная техника, а также устаревшая мебель.

Лабораторное оборудование является основным инструментом при работе в лаборатории, поэтому следует обратить на ее утилизацию особое внимание. Для утилизации устаревшего оборудования и техники организация должна обратиться в утилизирующую компанию. Но следует помнить, что не только техника должна подвергаться правилам утилизации. Так же особое внимание требует утилизация офисной мебели, которая устарела или пришла в негодное состояние. Для реализации этого процесса существуют специализированные утилизирующие компании.

Для поддержания охраны окружающей среды макулатура должна подлежать дальнейшей переработки. Именно поэтому необходимо наладить бесперебойную работу организации или подразделения с пунктом приема макулатуры.

4.6 Защита в чрезвычайных ситуациях

К возможным чрезвычайным ситуациям на рабочем месте в лаборатории можно отнести пожар, обрушение здания, землетрясение и взрыв.

К наиболее вероятной ЧС, которая может произойти, в первую очередь относится пожар. Возникновение пожара на рабочем месте может быть обусловлено возгоранием неисправных розеток, тройников, оголенных проводов, неисправности электрических вилок, неправильного подключения оборудования, нарушения техники безопасности [52].

В помещении лаборатории установлены: пожарные извещатели автоматической сигнализации, передающие сигнал в помещение пожарного поста охраны или диспетчерской здания, а также имеются, воздушно-эмульсионные, порошковые, углекислотные огнетушители. Углекислотные лучше всех подходят для использования в офисах, поскольку их использование не сопровождается загрязнением компьютеров и другой оргтехники. В помещениях должны находиться планы эвакуации с указанием выходов, а сотрудники должны систематически проходить обучение ПТМ.

В случае возникновения пожара, сотрудники организации обязаны позвонить по номеру 01 или 101, сообщить точный адрес и место возгорания. Также, сотрудники должны принять возможные меры по ликвидации и локализации пожара, эвакуации персонала и сохранению материальных ценностей.

6.7 Заключение по разделу социальная ответственность

В разделе социальная ответственность данной магистерской диссертации были рассмотрены вредные и опасные факторы производственной среды, правовые и организационные меры по обеспечению безопасности, негативное влияние на окружающую среду в виде выбросов в литосферу, а также возможные чрезвычайные ситуации.

К вредным и опасным факторам рабочего места исследователя относятся: возможные отклонения показателей микроклимата, повышенный уровень шума на рабочем месте, неудовлетворительная освещенность рабочей зоны и факторы от ПЭВМ.

Заключение

Предварительная работа продемонстрировала возможность исследования изменений энергетических уровней электронов зоны проводимости, валентной зоны, структурирования плазмонов и связи изменения энергии плазмонов с изменениями мезоскопических структурных состояний кристаллической решётки металлов и сплавов после модификации твердого тела.

Метод электронной оже-спектроскопии начал интенсивно использоваться в материаловедении с начала ранних 70-х годов. Диаметр пучка сканирующей электронной пушки составлял около 0.5 мкм, - это ограничение было обусловлено низким вакуумом в системе. Изоляция электрических цепей от вакуумного объема осуществлялась с помощью резиновых соединений. Система магнитной фокусировки обладает отрицательным качеством в том плане, что в материале, из которого она изготавливается, находится огромное количество трудно откачиваемых скрытых полостей. Применение электростатической фокусировки было невозможно из-за наличия пробоя вследствие низкого вакуума. С этими ограничениями однофокусная электростатическая система для электронного 16 оже-сканирования просуществовала до 90-х годов, при этом ускоряющее напряжение в таких приборах было 3 – 5 кэВ. Прорыв в этом направлении был сделан в начале 90-х, когда были разработаны сканирующие электронные пушки с двухлинзовой фокусировкой, отклоняющей системой и системой стигматоров, совместимых со сверхвысоким вакуумом. Были созданы керамические изоляторы, обеспечивающие сверхвысокий вакуум в системе (Teflon и Capton), сделан переход от системы откачки с использованием масляных насосов к турбомолекулярным и ионно-гетерным насосам. Кроме этого, условия сверхвысокого вакуума позволили использовать термоэмиссионные катоды с меньшей температурой накала, что способствовало уменьшению монохроматических aberrаций. Параметры

таких источников электронов стали сравнимы с параметрами традиционных РЭМ: ускоряющее напряжение $U_A = 25 - 30 \text{ кэВ}$ и $d_p = 30 - 100 \text{ нм}$.

Такие усовершенствования сделали возможным переход от микроанализа к наноанализу в методе электронной оже-спектроскопии, в соответствии с основными требованиями, предъявляемыми к науке о нанoeлектронике и наноструктурированных материалах. Будучи оснащенным оборудованием для профилирования по глубине, то есть источником ионов, метод растровой оже-микроскопии позволяет выполнять трехмерный наноанализ [13].

Перечень публикаций

За время выполнения научно-исследовательской работы выпускник стал соавтором 5 публикаций в российских и зарубежных изданиях:

1. Панин В.Е., Шулепов И.А., Ботаева Л.Б., Наркевич Н.А. Исследование электронно-энергетических спектров упруго и дискретно рассеянных электронов поверхности разрушения сплава Ti-6Al-4V после поперечно-винтовой прокатки при температуре 1000 °C/ Физическая мезомеханика 23 3 (2020) 5–14. DOI 10.24411/1683-805X-2020-13001

2. Шулепов И.А., Ломыгин А.Д., Ботаева Л.Б., Лаптев Р.С., Наркевич Н.А., Кашкаров Е.Б., Сыртанов М.С. Исследование электронной структуры атомов, в деформированном сплаве Ti-6Al4V при анализе спектров упруго и дискретно рассеянных электронов // Тезисы докладов Международной конференции «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии», посвященной 90-летию со дня рождения основателя и первого директора ИФПМ СО РАН академика Виктора Евгеньевича Панина, 5–9 октября 2020 года, Томск, Россия. – Томск: Издательство ТГУ, 2020. – С. 477-478.<https://mega.nz/file/Dup2IJAJ#r7SKxYcX-v4Y5egTUUIkEGWjHST16StH-zvfzTTZ32U>

3. Шулепов И.А., Ломыгин А.Д., Ботаева Л.Б., Лаптев Р.С., Наркевич Н.А., Кашкаров Е.Б., Сыртанов М.С. Исследование угловых зависимостей выхода упруго и дискретно рассеянных электронов из деформированного сплава Ti-6Al-4V // Тезисы докладов Международной конференции «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии», посвященной 90-летию со дня рождения основателя и первого директора ИФПМ СО РАН академика Виктора Евгеньевича Панина, 5–9 октября 2020 года, Томск, Россия. – Томск: Издательство ТГУ, 2020. – С. 479-

480. <https://mega.nz/file/Dup2IJAJ#r7SKxYcX-v4Y5egTUUIkEGWjHST16StH-zvfzTTZ32U>

4. I.A. Shulepov, A. D. Lomygin, L.B. Botaeva, R.S. Laptev, E.B. Kashkarov, M.S. Syrtanov. Investigation of the electronic structure of atoms in modified metal alloys in analysis of the elastic and discrete scattered electron spectra. // 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE-2020 online): Abstracts. — Tomsk. September 14–25: Publishing House of IAO SB RAS, 2020. C. 485. https://psv4.userapi.com/c856228/u231326011/docs/d9/c89dc2b11cfc/Book_of_Abstracts.pdf?extra=3ffC7IexGDpEn6GnheFnLPyMwZIR4x9dkxJUAVQ3dti2qDBWE8THsZAJ6PJ21oYJfX6skVHnfXUt2-1M_aayoGWqdySzAWS-SNVCPcPI0sgV7urofTzcDOchviiRB3RF4n2HUvcKm5tdA

5. I.A. Shulepov, A. Lomygin, L.B. Botaeva, R.S. Laptev, E.B. Kashkarov, M.S. Syrtanov. Investigation of the Electronic Structure of Atoms in Modified Metal Alloys in Analysis of the Elastic and Discrete Scattered Electron Spectra // 2020 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE). – IEEE, 2020. – C. 881-885. <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9242153>

Список литературных источников

1. Quinn J.J., Phys. Rev., 126. 1453 (1962).
2. А.С. Паршин. Физика поверхности и границ раздела. Учебный курс. Кафедра Технической физики. Сибирская аэрокосмическая академия. Раздел 5. <http://www.sibsauktf.ru/courses/surface/>.
3. Seah M.P., Dench W.A., Surface Interface Analysis, 1, 2 (1979).
4. Зигбан К., Нордлинг К. Электронная спектроскопия. Пер. с англ. М.: Мир; – 1973; – 493с. https://www.studmed.ru/zigban-k-nordling-k-elektronnaya-spektroskopiya_ae7fa41b0c5.html.
5. Фирмэнс Л., Вэнник Дж., Декейсер В. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел. Перевод с английского под редакцией доктора физико-математических наук В.И. Раховского. – М.: Мир. - 1981г. – 468с. <https://pl.b-ok.cc/book/2983705/be608a>.
6. Citrin P.H., Phys. Rev., B8, 5545 (1973).
7. Фелдман Л., Майер Д. Основы анализа поверхности и тонких пленок. Пер. с англ. – М.: Мир, 1989. – 344с. <http://en.bookfi.net/book/542020>.
8. Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности М., Мир, 1989 – 564с. https://www.studmed.ru/vudraf-d-delchar-t-sovremennyye-metody-issledovaniya-poverhnosti_d1149d1ce09.html.
9. Альфорд Т.Л., Фельдман Л.К., Майер Дж.В. Фундаментальные основы анализа нанопленок. М.: Научный мир, 2012. – 392с. <https://pl.b-ok.cc/book/3268042/c1563c>.
10. Афанасьев В.П. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел Соросовский образовательный журнал, №2, 1999. <http://en.bookfi.net/book/818097>.
11. Афанасьев В. П., Лубенченко А. В., Федорович С. Д., Паволоцкий А. Б. Отражение электронов килоэлектронвольтных энергий от многослойных поверхностей. Журнал технической физики, 2002, том 72, вып. 11.

12. Биленький С.М. Рассеяние микрочастиц // Физическая энциклопедия / Ред. А. М. Прохоров. — М.: Советская энциклопедия, 1992. — Т. 4. — С. 271-273.
13. Бронштейн И.М., Пронин В.П., Хинич И.И., Чистотин И.А. Спектроскопия упругого отражения электронов как эффективный метод диагностики поверхности твердого тела // Известия РГПУ им. А.И. Герцена: Научный журнал: Физика. 2006. № 6 (15). С. 151–165.
14. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. - 791с.
15. Макаров В.В. Закономерности взаимодействия электронов с твердым телом и развитие методов анализа приповерхностных слоев материалов: Дис. д-ра физ.-мат. наук. Л.. 1990.
16. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твёрдых телах. М. Мир, 1965, 381с. (Гл.3).
17. Ханнанов Максим Наилевич Микроволновая спектроскопия магнитоплазменных возбуждений в двумерных электронных и дырочных структурах. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Черноголовка 2010. 185с.
18. Волков В.А. Плазмоны и магнитоплазмоны: объемные, поверхностные, двумерные и краевые; влияние на отклик полупроводниковых структур в гига- и терагерцовом диапазоне. Институт радиотехники и электроники РАН, Москва, Россия. 7С. http://www.ioffe.ru/winter_school/handouts2005/volkov.pdf
19. Земцов Ю.К., Бычков К.В. Курс лекций по атомной физике. . <http://heritage.sai.msu.ru/ucheb/Zemcov/index.html>.
20. Паршин А.С. Спектроскопия неупруго отраженных электронов твердотельных наноструктур элементарных полупроводников, магнитных металлов и их соединений. Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева, Красноярск, 2017.
21. Справочник химика 21. Химия и химическая технология, стр.67, <https://chem21.info/page/6509525003522112422124111008610216313719209024/>.

22. Панин В.Е., Шулепов И.А., Панин А.В., Перевалова О.Б., Власов И.В. Влияние наномасштабных мезоскопических структурных состояний, связанных с кривизной кристаллической решетки, на механическое поведение титанового сплава Ti-6Al-4V // Физ. мезомех. - 2019. - Т. 22. - № 6. - С. 14-23. - DOI: 10.24411/1683-805X-2019-16002
23. Мелешко В.В., Папков С.О. Изгибные колебания упругих прямоугольных пластин со свободными краями: от Хладни (1809) и Ритца (1909) до наших дней. Акустичний вісник. 2009. Том 12, N 4. С. 34-51
24. Изображение нанопроводов (диаметр < 200нм) с различной формой сечения, а также результаты моделирования транспорта поверхностных плазмонов-поляритонов. <http://sci-lib.com/article1941.html>
25. Панин В.Е., Овечкин Б.Б., Хайруллин Р.Р., Лидер А.М., Бордулев Ю.С., Панин А.В., Перевалова О.Б., Власов И.В. Влияние кривизны решетки титана и титанового сплава Ti-6Al-4V на усталостную долговечность и ударную вязкость // Физ. мезомех. - 2019. - Т. 22. - № 5. - С. 5-12.
26. Омар Ахмед Омар Мослех. Сверхпластическая деформация титановых сплавов с разной исходной микроструктурой. Дис. канд. тех. наук. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, 2019.
27. Панин В.Е., Шулепов И.А., Ботаева Л.Б., Наркевич Н.А. Исследование электронно-энергетических спектров упруго и дискретно рассеянных электронов поверхности разрушения сплава Ti-6Al-4V после поперечно-винтовой прокатки при температуре 1000 О С / Физическая мезомеханика 23 3 (2020) 5–14).
28. Guzev M.A., Dmitriev A.A. Bifurcational behavior of potential energy in a particle system // Phys. Mesomech. – 2013. – V. 16. – No. 4. – P. 287–293.
29. Matsukawa Y., Zinkle S.J. One-dimensional fast migration of vacancy clusters in metals // Science. – 2007. – V. 318. – P. 959–960.

30. Panin V.E., Egorushkin V.E., Elsukova T.F., Surikova N.S., Pochivalov Yu.I., Panin A.V. Multiscale Translation Rotation Plastic Flow in Polycrystals // Handbook of Mechanics of Materials / Ed. by C.H. Hsueh et al. – Singapore: Springer Nature, 2018. – doi 10.1007/978-981-10-6855-3_77-1
31. Panin V.E., Surikova N.S., Panin S.V., Shugurov A.R., Vlasov I.V. Effect of nanoscale mesoscopic structural states associated with lattice curvature on the mechanical behavior of Fe–Cr–Mn austenitic steel // Phys. Mesomech. – 2019. – V. 32. – No. 5. – P. 382–391. – doi 10.1134/S1029959919050059
32. Panin V.E., Panin A.V., Perevalova O.B., Shugurov A.R. Mesoscopic structural states at the nanoscale in surface layers of titanium and its alloy Ti–6Al–4V in ultrasonic and electron beam treatment // Phys. Mesomech. – 2019. – V. 22. – No. 5. – P. 345–354. – doi 10.1134/S1029959919050011
33. Егорушкин В.Е., Панин В.Е., Панин А.В. О физической природе пластичности // Физ. мезомех. – 2020. – Т. 23. – № 2. – С. 5–14.
34. Власов И.В., Егорушкин В.Е., Панин В.Е., Панин А.В., Перевалова О.Б. Фрактография, вязкость разрушения и структурная турбулентность при низкотемпературном ударном нагружении неравновесного титанового сплава Ti–6Al–4V // Изв. РАН. МТТ. – 2020.
35. Троицкий О.А. Электромеханический эффект в металлах // ЖЭТФ. – 1969. – Т. 10. – № 1. – С. 18–22.
36. Conrad H. Electroplasticity in metals and ceramics // Mater. Sci. Eng. A. Struct. – 2000. – V. 287. – P. 276–287.
37. Roth J.T., Locker I., Mauck D., Warner M., Golovashchenko S.F., Krauze S.F. Enhanced formability of 5754 aluminum sheet metal using electric pulsing // Trans NAMRI/SME. – 2008. – V. 36. – P. 405–412.
38. Roh J.-H., Seo J.-J., Hong S.-T., Kim M.-J., Han H.N., Roth J.T. The mechanical behaviour of 5052–H32 aluminum alloys under a pulsed electric current // Int. J. Plasticity. – 2014. – V. 58. – P. 84–99.

39. Столяров В.В. Влияние химического и фазового состава на проявление ЭПЭ в титановых сплавах // Изв.РАН. Физика. – 2014. – Т. 78. – № 3. – С. 357–360.
40. Egorushkin V.E., Panin V.E., Panin A.V. Lattice curvature, shear bands, and electroplastic effect // Phys. Mesomech. – 2018. – V. 21. – No. 5. – P. 390–395. – doi 10.1134/S1029959918050028
41. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р. Тухватулина, И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.В. Шаповалова; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 73 с.
42. ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».
43. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы [Электронный ресурс]. - Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».
44. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация [Электронный ресурс]. - Справочно–правовая система «КонсультантПлюс»;
45. СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».
46. СН 2.2.4/2.1.8.562-96 Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки. Санитарные нормы [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс»
47. ГОСТ 12.1.003-2014 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (Переиздание) [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».

48. ГОСТ 12.1.029-80 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства и методы защиты от шума. Классификация [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».
49. СНиП 23-05-95* Естественное и искусственное освещение (с Изменением № 1) [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».
50. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03 Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».
51. ГОСТ Р 12.1.019-2009 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс»
52. Федеральный закон от 22 июля 2008 г. № 123-ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» [Электронный ресурс]. – Справочно–правовая система «КонсультантПлюс».
53. I.A. Shulepov, A. Lomygin, L.B. Botaeva, R.S. Laptev, E.B. Kashkarov, M.S. Syrtanov. Investigation of the Electronic Structure of Atoms in Modified Metal Alloys in Analysis of the Elastic and Discrete Scattered Electron Spectra //2020 7th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE). – IEEE, 2020. – С. 881-885. <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/9242153>

Приложение

Part 2 «Research of Electronic Structure and Angular Dependencies of Elastic and Discrete Electrons Scattered From the Surface of a Deformed Alloy Ti-6AL-4V»

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4БМ9И	Ботаева Лариса Борисовна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Д.т.н., профессор ОМ ИШНПТ НИ ТПУ	Клименов В.А.	Д.т.н., профессор		

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель отделения иностраных языков Школы базовой инженерной подготовки НИ ТПУ	Шатохина А.О.	К. филол. н.		

2.1 Research of Electronic Structure

With any modification of a solid, for example, implantation of high-energy ions, heat treatment, deformation, alloying or other, the energy states of the atoms' electrons the solid body is composed of change. This is due to the fact, that the atoms change their arrangement in the crystalline structure, their chemical environment changes, and the crystal structure is being deformed, in comparison with the initial state.

There are research works [53] that reveal the correlation between a solid modification and changing of the spectra shape and secondary electrons, including elastically and discretely scattered electrons, as well as a change in these spectra depending on the exit angle of secondary electrons.

The electrons with secondary electron emission are divided into:

1. Elastically scattered electrons (ESE).
2. Not elastically scattered.
3. Secondary electrons.

Using a graph of electron energy distribution during secondary electron emission (Fig. 1), which is widely used in textbooks and monographs, we consider the structure of the secondary electron spectrum.

Elastically scattered: The Peak 1, located at an energy equal to the energy of the primary incident beam, corresponds to elastically scattered electrons. It is generally accepted, that this peak includes electrons that could be scattered by phonons, but most devices cannot register such small transferred energies.

Non-elastically scattered: Non-elastically scattered electrons are those that have lost their energy at least during one scattering event. The Peak 2 corresponds to electrons that have experienced discrete energy losses when interacting with plasmons.

A plasmon (a quantum of plasma oscillations) is a pseudo particle that represents a combination of oscillating electrons and its associated electromagnetic

field. They arise in solids or near their surface due to vibrations of electrons relating to conduction ions.

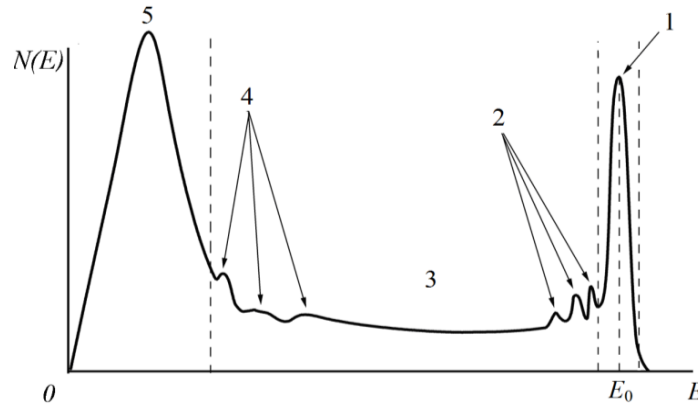


Figure 1 – Graph of the electrons distribution in energy during secondary electron emission. 1 – peak of elastically reflected electrons; 2 – electron peaks experienced discrete energy losses during interaction with plasmons; 3 – part of the spectrum showing the spectrum of electrons scattering energy in chaotic collisions; 4 – peaks of electrons with energy characteristic corresponding to the elemental composition – Auger electrons; 5 – peak of true secondary electrons.

There are bulk and surface plasmons. The bulk ones exist during electron vibrations inside the ionic lattice of matter. The surface ones represent the quanta of density fluctuation of free metal electrons along its boundary with a dielectric. A plasmon is a quantum of plasma oscillations and has an energy $\hbar\omega_p$ of about 15 eV. From a classical point of view, the plasma frequency is determined by the oscillations of valence electrons in a metal with respect to positively charged cores of atoms.

The part 3 of the spectrum shows electrons that have lost their energy in continuum excitation (homogeneous medium). Usually, they contribute to the structureless spectrum, that lies from low energies to the elastic peak.

The peaks 4 refer to characteristic electrons – Auger electrons.

Secondary electrons: The peak 5 corresponds to secondary electrons. Most of “true” secondary electrons give rise to a very intense peak lying at low energy,

usually less than 50 eV. It is assumed that they arise as a result of "cascade" processes of energy loss by primary high-energy electrons.

2.2 Materials and Research Methods

This work aims to detect changes in the electronic structure of the Ti-6Al-4V alloy after helical rolling at a temperature of 1000°C.

The samples were 5x10 mm² and 1 mm thick. The surface was ground and polished to a roughness of Ra = 0.05 μm and washed to remove impurities.

The spectra in the form of N(E) were obtained on a modernized Auger spectrometer 09-IOS-10 at the ISPMS SB RAS. The electron energy is 3 keV. The area of the analyzed surface is 100x100 μm². In order to exclude random error, the spectra were recorded repeatedly, with several days' interruptions. The spectra were obtained as an average of ten. The error in the deviation of the shape and energy of the spectra did not exceed 1%. The background was modeled and subtracted using the Shirley method.

In the vacuum chamber, the samples were placed side by side in the same plane, and the spectra were recorded at the same time and with the same spectrometer setup. Before recording the spectra, the surface of the samples was atomized to atomically pure by Ar⁺ ions with an energy of 3 keV, at 70 degree angle, comparing to the surface normal. When recording the spectra, in order to exclude the adsorption of atoms from the residual atmosphere, the ion sputtering continued, but the current density decreased to optimal. The pressure in the analysis chamber was maintained at 10⁻⁴ Pa.

Auger spectrometer 09 IOS 10 is equipped with an energy analyzer of the type cylindrical mirror (CMA). This kind of analyzer consists of two coaxial hollow metal cylinders (Fig. 2(a)). In the inner cylinder 5 there are windows 5 and 6 to enable the passing of incoming and outgoing secondary electrons, respectively. A changing voltage 11 is applied to the outer cylinder 1. This voltage is negative comparing to the inner cylinder (Fig. 2(b)), and is modulated by a sinusoidal signal of frequency f.

An electron beam 4 with an energy E_0 generated by an electron source 3 initiates the secondary electron emission 7 from the near-surface region of the sample 9. As a result of deviation, from the original path and under the influence of an electric field, the electrons fly into the energy analyzer at a certain velocity at the emission angle θ . Then, they will move along a curved path and focus on the output at the point where the electron multiplier 8 is located. In this case, sample 9 should also be in the focus of the analyzer, i.e. at a distance of 12 mm from the end of the outer cylinder, while the secondary electron emission angle $\Delta\theta = \theta_1 - \theta_2$ is 10 degrees.

One of the characteristics of the CMA is its resolution R . At a certain width of slits 5 and 6, the analyzer will allow the electrons to pass with an angular spread $\pm\Delta\theta$ and an energy spread ΔE . Two lines of the spectrum of equal intensity with a certain average energy E are considered acceptable if, when superimposed, the resulting curve has a required minimum. The ratio of the average energy of these lines to the difference between the energies of the lines ΔE determines the resolution of the analyzer: $R = E/\Delta E$.

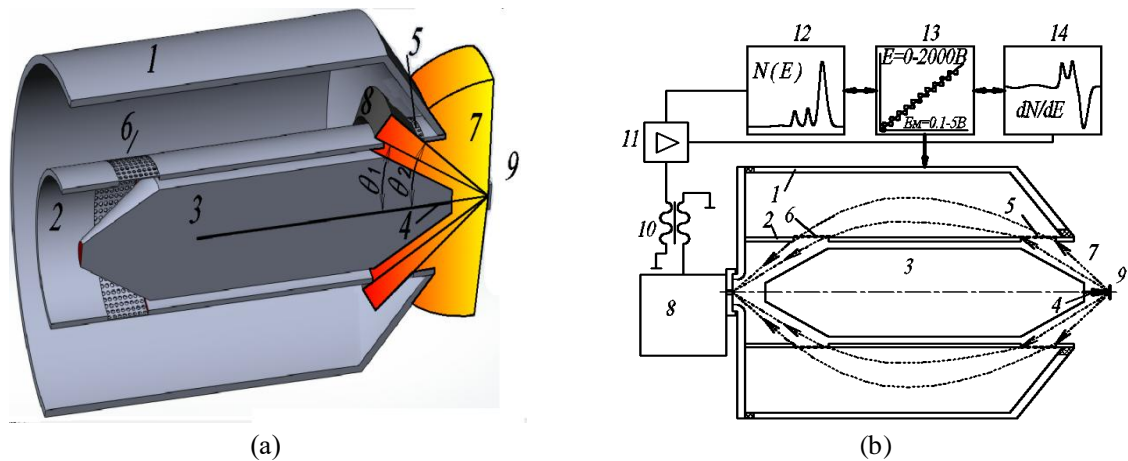


Figure 2 – Schematic representation of the mechanism for recording the spectra of elastically and discretely scattered secondary electrons: (a) three-dimensional image of the exit of secondary electrons 7 from the surface of the sample 9, (b) scheme for recording elastically and discretely scattered secondary electrons

The reciprocal of the resolution of the analyzer, $\rho = 1/R$, is called the relative resolution of the analyzer. In this work, the value of ρ was 0.2...0.5%. A scheme for recording spectra in the form of $N(E)$ and dN/dE is shown in Fig. 2(b).

A high-voltage modulated signal from the output of the wind turbine 8 is fed to an isolation transformer 10, the variable component of the signal with a frequency f from the secondary winding is fed to the pre-amplifier, and then to the signal extraction systems, where it is synchronously recorded in the form of $N(E)$ and dN/dE .

2.3 Research Results and Discussion

The spectra (the average of five spectra) of elastically and discretely scattered electrons recorded in the form of $N(E)$ at an elastic scattering energy of 980 eV are shown on figure 3. The sample was in the focus of the analyzer. The spectra are displayed in two forms where: (a) – intensity values during registration and (b) – intensity values normalized to the maximum of elastically scattered electrons. It should immediately be noted that the intensity of the spectra from the sample in the initial state is lower than after helical rolling. This is most likely due to the fact that the density of the deformed samples is higher than the initial ones, and therefore the energy loss by primary electrons is higher by about 4.6 eV.

For a more detailed analysis of changes in the scattering spectra, the experimental spectra were transformed as follows:

- energies of the peaks of the elastically scattered electrons were reduced to zero (Fig. 3);
- spectra were decomposed into Gaussians, the value of the energy of losses is indicated above each peak (Fig. 3);
- figure 4 shows the components of the spectra of discretely scattered electrons;
- Gaussians were integrated, and the results are presented in tables;
- table summarizes the intensities, the peak energies and the magnitude of the energy loss of the constituent spectra of discretely scattered electrons.

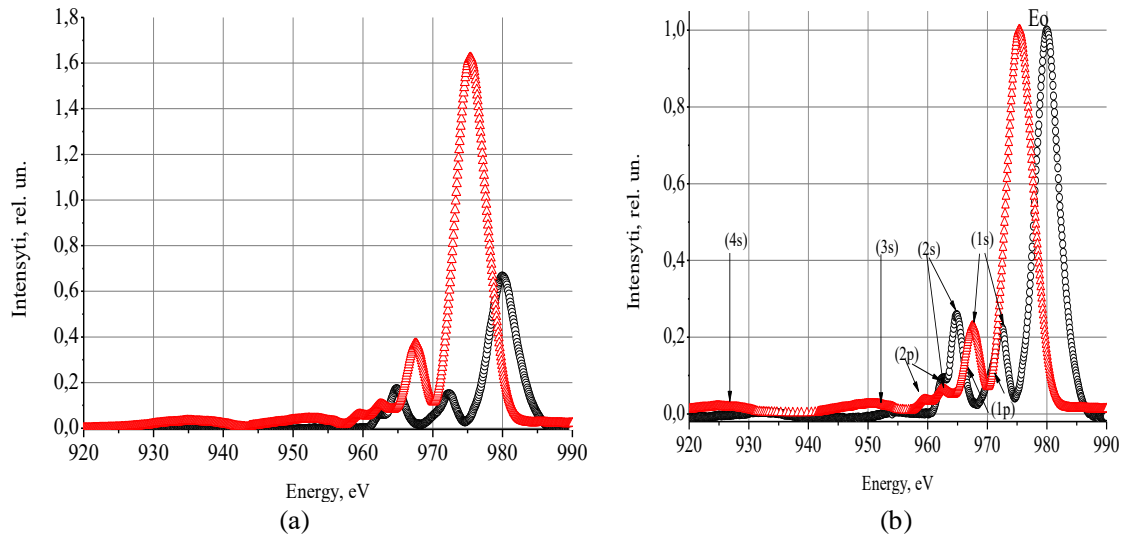


Figure 3 – Spectra of elastically and discretely scattered electrons, at a recording angle $\alpha = 33$ degrees (analyzer focus) from the surface of the Ti-6Al-4V alloy: a – normalized to a maximum of elastically scattered electrons (980 eV), b – normalized to a maximum of elastically scattered electrons (980 eV). \circ – initial state; Δ – exposed to longitudinal helical rolling at 1000°C.

From the research works examined, it follows that line 0 corresponds to elastically scattered electrons. The symbols 1s, 2s, 3s, 4s denote the lines of the spectra of electrons that scatter energy to excite one, two, three, and four surface plasmons. Symbols 1p, 2p denote the lines of the spectra of electrons that scatter energy to excite one or two bulk plasmons.

From a comparison of the results shown in Fig. 5 and in the table, it follows that there is a transformation of the spectra lines, characterizing the energy loss at bulk and surface plasmons in a deformed sample, compared with the initial one.

It has already been noted that the intensity of the lines from the deformed sample is greater than the initial one. An analysis of the line intensities, after normalizing to the sum, shows that the intensities 1s, 3s, and 4s increase, while other intensities decrease.

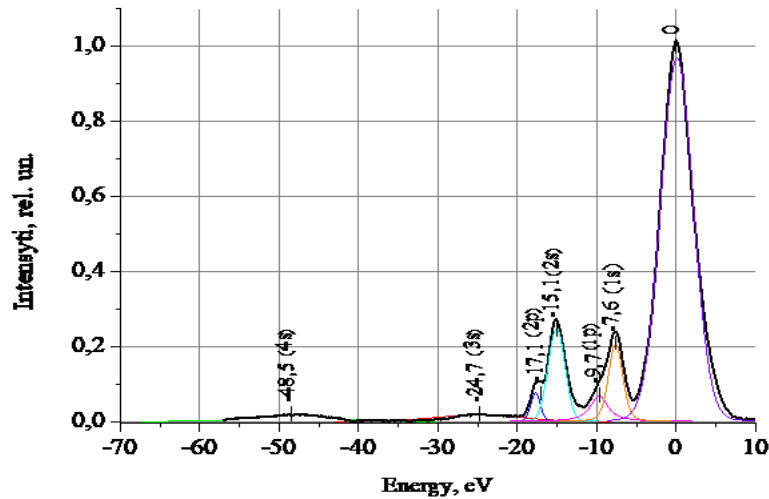


Figure 4 – Example of decomposition into elastic components of the spectrum of elastically and discretely scattered electrons (Fig. 3)

Thus, it can be concluded that during deformation, the energy levels of electrons are rearranged, and because of this, the amount of energy scattering by plasmons changes.

The dependences on the emission angle of the secondary electrons (Fig. 6) from the surface of the Ti-6Al-4V alloy were determined from the spectra (Fig. 3a) recorded as sample 9 approached from the analyzer's focus, decreasing the distance from 12 to 4 mm (the recording step was $0.1 \div 0.3$ mm). In this case, the change in the recording angle $\Delta\theta$ was 22 degrees.

Figure 7 shows the cross section of the solid angle θ at which the exit of elastically and discretely scattered electrons was recorded, depending on the angle of departure, from the surface in accordance with the scheme illustrated at figure 2a. The cross section contains plots (Fig. 3, 4) of the dependences on the emission angle: the intensity of energy dissipation on surface plasmons of the 1s line (marked with \circ , green) and the intensities of energy dissipation at bulk plasmons 1p (marked with Δ , red), a – for the original and c – for the deformed; the changes in the energy of the lines (Fig. 3, 4) 1s (marked with \circ , green) and 1p (marked with Δ , red), b for the initial and d – deformed.

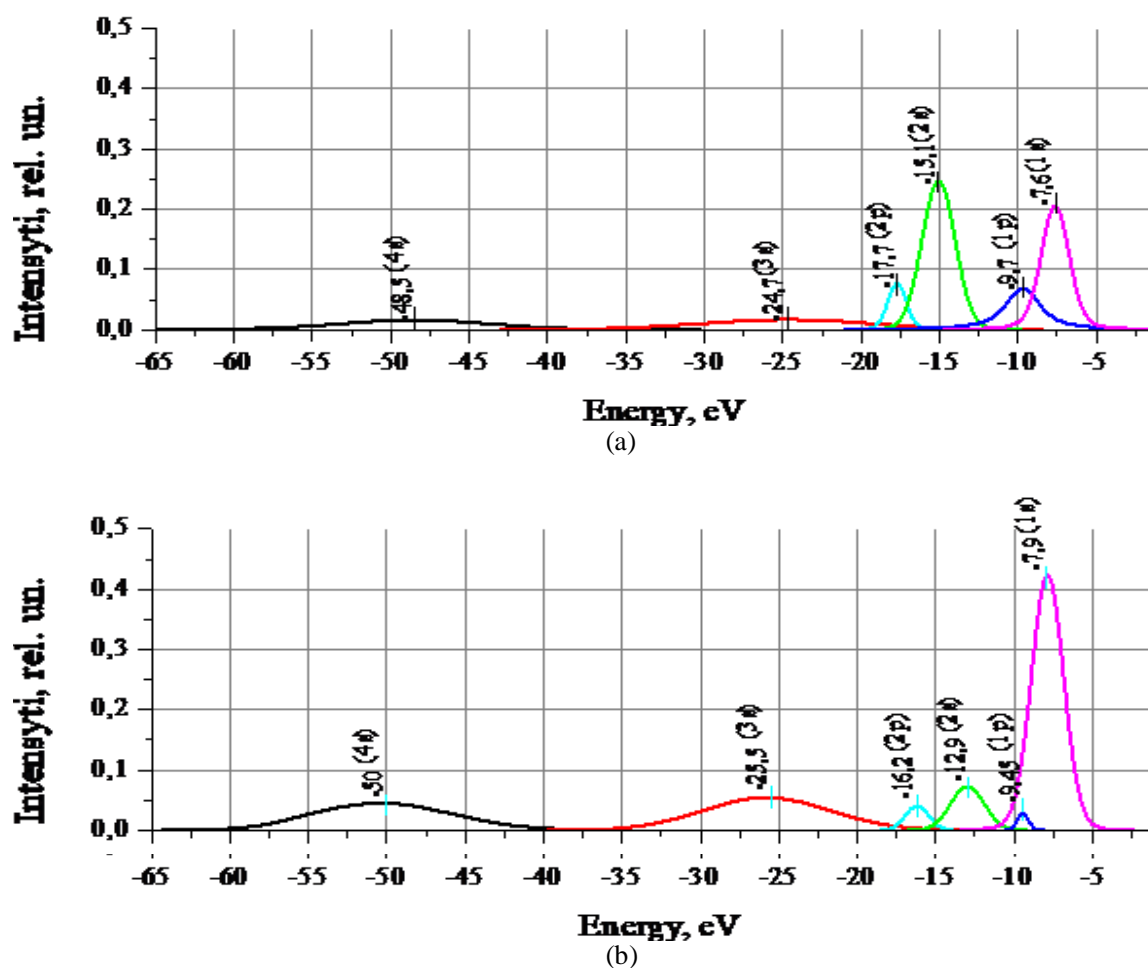


Figure 5 – Components of the spectra of discretely scattered electrons (the energy of elastically scattered electrons of 730 eV is reduced to zero, Fig. 4). (a) initial state Ti-6Al-4V, (b) Ti-6Al-4V exposed to helical rolling at 1000°C

Table 1 – Intensities, peak energies and magnitude of energy losses of the constituent spectra of discretely scattered electrons

Initial	Lines	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Discrete scattered electron energy loss, eV	48,5	24,7	17,7	15,1	9,7	7,6
	Peak intensities	0,21	0,24	0,12	0,66	0,26	0,5
	Normalized to the amount	0,11	0,12	0,06	0,33	0,13	0,25
Deformed	Lines	4s	3s	2p	2s	1p	1s
	Discrete scattered electron energy loss, eV	50,4	25,7	16,2	12,9	9,5	7,9
	Peak intensities	0,51	0,53	0,07	0,2	0,02	1,1
	Normalized to the amount	0,21	0,22	0,03	0,08	0,008	0,45

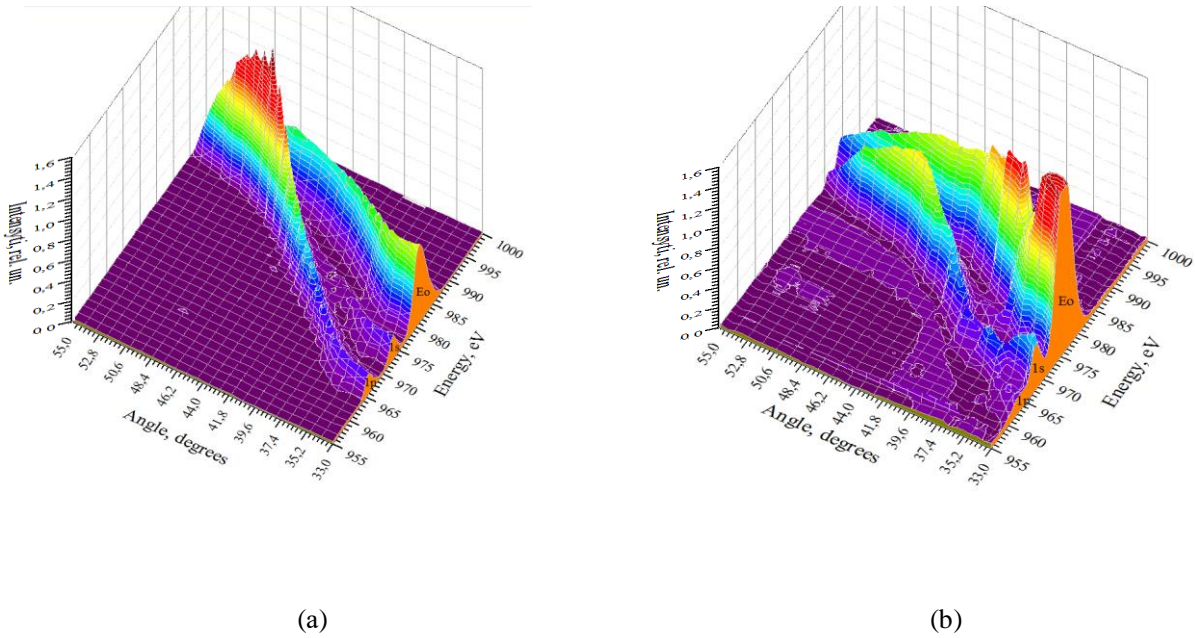


Figure 6 – Spectra of elastically and discretely scattered electrons depending on the emission angle θ (Fig. 2) from the surface of the Ti-6Al-4V alloy: (a) initial state, (b) exposed to helical rolling at 1000°C. Primary electron energy 980 eV

The research results (Fig. 7) revealed a significant change in the spectra of elastically and discretely scattered electrons. Firstly, the electron emission intensities are not evenly distributed in the cloud of secondary electron emission. Secondly, the intensities of the yield and energy of electrons from the deformed alloy differ from the initial state.

Thus, it follows that during deformation, the energy levels of electrons are rearranged, and this leads to plasmon energy changes. This can be explained by the fact that the crystal lattice undergoes rearrangement during deformation, when the atoms change their position. The processing at $T = 1000^{\circ}\text{C}$ by helical rolling greatly reduces the lattice parameter $a = 0.3191$ nm of the alloy, compared with its value in the equilibrium initial state $a = 0.3232$ nm.

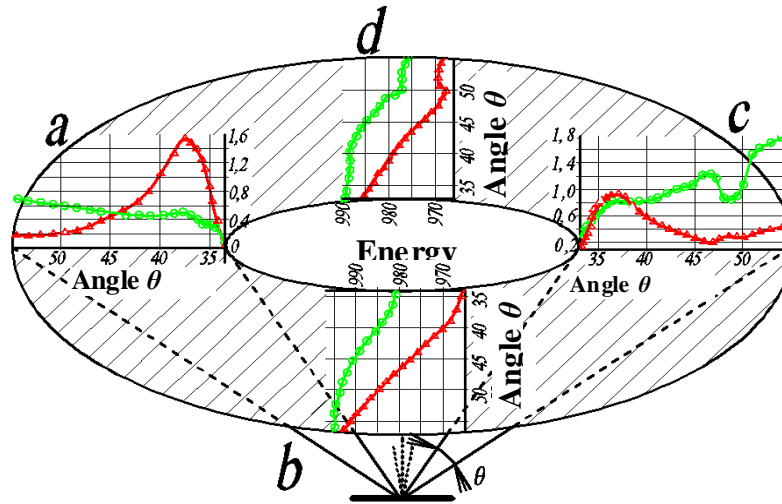


Figure 7 – Section of the solid angle θ , at which the output of elastically and discretely scattered electrons was recorded in accordance with the emission angle wise, as represented at scheme in Fig. 1: line intensities (Fig. 3) 1s (marked \circ , green) and 1p (marked Δ , red color), and - for the original and c - deformed; line energies (Fig. 2, 3) 2 (indicated by \circ , green) and 3 (indicated by Δ , red), b for the initial and d for deformed

A specific feature of Ti-6Al-4V alloy is its two-phase state, in which titanium in the α phase has an HCP-lattice, and titanium in the β phase has a BCC-lattice. The electronic states of these two modifications of titanium are radically different.

In α -Ti, the electronic states are controlled by s-p electrons having spherical symmetry, in β -Ti, by spatially oriented d-electrons. The curvature of the lattice will strongly affect the energy state of s-p electrons and the associated nanoscale mesoscopic structural states.

2.4 Conclusion

A study of the change in the spectra of elastically and discretely scattered electrons in a Ti-6Al-4V alloy exposed to helical rolling at 1000°C, in comparison with the initial state, is carried out. The differences in the spectra revealed a change in the electronic subsystem. These changes affect the formation of bulk and surface plasmons upon excitation of the near-surface region by an electron beam.

The considered method allows one to obtain additional information about the change in the energy states of electrons in the valence and conduction bands of the alloys subjected to deformation.